

清华大学学术专著

---

# 量子力学的前沿问题

## (第3版)

---

张礼 葛墨林 编著

---



清华大学出版社  
北京

## 内 容 简 介

本书第1~7章主要介绍了关于量子力学概率诠释的爱因斯坦与玻尔争论问题的研究、波粒二象性进展以及量子力学基础理论在其他方面的发展,例如:波函数的几何相、拓扑相、量子力学与经典力学的界限与宏观水平量子力学等。第8~10章论述了腔量子电动力学、量子霍尔效应和玻色-爱因斯坦凝聚等领域的进展。第11~13章着重介绍了杨振宁-巴克斯特系统与量子力学的密切关系。

本书可供物理学工作者阅读、参考,可以对相关专业的大学本科生和研究生从基础理论学习过渡到专题科学研究起引导作用。

本书封面贴有清华大学出版社防伪标签,无标签者不得销售。

版权所有,侵权必究。举报:010-62782989, beiqinquan@tup.tsinghua.edu.cn。

### 图书在版编目(CIP)数据

量子力学的前沿问题/张礼,葛墨林编著. —3版. —北京:清华大学出版社,2022.9

(清华大学学术专著)

ISBN 978-7-302-60363-4

I. ①量… II. ①张… ②葛… III. ①量子力学—研究 IV. ①O413.1

中国版本图书馆CIP数据核字(2022)第044097号

责任编辑:戚 亚

封面设计:傅瑞学

责任校对:王淑云

责任印制:丛怀宇

出版发行:清华大学出版社

网 址: <http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址:北京清华大学学研大厦A座 邮 编:100084

社总机:010-83470000

邮 购:010-62786544

投稿与读者服务:010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质量反馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

印 装 者:三河市东方印刷有限公司

经 销:全国新华书店

开 本:185mm×260mm 印 张:40.75

字 数:987千字

版 次:2000年4月第1版 2022年10月第3版

印 次:2022年10月第1次印刷

定 价:198.00元

---

产品编号:085754-01

# 前 言

写这本书的缘起,可以追溯到1983年,那一年杨振宁教授在美国纽约州立大学石溪分校开设了现代物理专题十二讲。作者葛墨林曾有幸听讲,受到很大启发。杨先生强调物理学研究课题会涉及不同的分支学科,问题的解决也需要融合各方面的知识。研究生在学习中应该广泛注意物理学各方面出现的新的概念、进展及其联系。

1986年杨振宁教授应中国科学技术大学研究生院邀请,在北京以“相位与近代物理”为题做了9次学术报告。内容涉及近代物理学中很多重要概念的萌芽、发展和确立,不仅深刻阐明了它们的理论内涵,还介绍了澄清概念的关键实验。杨先生在每次报告之后,都要和各单位的研究生代表共进工作午餐,进行无拘束的座谈。在讲座、报告及座谈中,杨先生对青年的工作、学习都给予了热情的关心和指导。他再三强调青年不仅要从事当前的课题研究,关心自己从事的研究方向,而且要关心物理学各方面出现的一些新概念,注意有关期刊上的报道。作者张礼听了全部讲座,深为杨先生严格精辟的报告和他对青年的关怀所折服。之后作者二人谈到听课的经历,有强烈的共识,决心要在各自的工作中实践杨先生的思想,并且决定合作写一本《量子力学的前沿问题》。

近年来,物理学的许多新进展都与量子力学中的一些概念发展有关,可以从量子力学的基础理论找到根源。在这些前沿领域中的进展同时也促进了量子力学理论本身的发展。在量子力学的概率诠释上存在著名的爱因斯坦与玻尔有关量子力学描述是否完备的争论。为了解决这个争论,多年来的理论与实验研究已经取得重要进展。有一些基础问题,例如电子通过双狭缝的干涉问题,从在经典物理学中形成的直观角度出发,是难以理解的。在量子力学的教科书中多用“想象中的实验”来解释。这些实际上不能实现的实验只能教人如何去思考,却不能令人信服。近年来,实验方法的惊人发展使想象变成了现实,一系列新的实验使许多概念上的难点得到澄清。在当前量子力学的研究领域开辟了一个极具挑战性的方向——量子信息学和量子计算。在这里被处理和传递的信息不再是经典的,它是量子态的叠加。这是基础科学和重大科技领域密切结合的又一个例子。近年来,量子力学波函数的几何和拓扑相位在许多问题中占据了主要位置。在量子力学与经典力学界限问题以及介观与宏观体系能体现量子相干性质等方面都有许多进展。上述的这些进展使人们对量子力学的本质和基础加深了认识,本书第1~7章介绍了这些内容。

在物理学的一些前沿领域,研究工作所得到的结果往往需要具有洞察力的分析。凝聚态物理中的分数量子霍尔效应能从二维电子集体态的波函数出发加以解释,从而揭示了一种新的量子流体的存在。这个例子说明量子力学的应用促进物理学各分支的发展,其成果也扩大了量子力学的用武之地。本书第8~10章选择了腔量子电动力学、量子霍尔效应、玻色-爱因斯坦凝聚等问题展开讨论。

杨振宁-巴克斯特系统是处理多体系统的一大类非线性量子可积模型的普遍理论。30年

来的进展使它成为数学物理中的一个蓬勃发展的分支。理论物理中不少问题,包括量子力学中最基础的氢原子的对称性、波函数相位的量子化等问题,都和它密切相关。本书第11~13章从这个角度对它做了初步的论述。

量子力学前沿的研究方向和课题是很广泛的,本书仅涉及了部分重要内容。本书所讨论的问题以量子力学(包括二次量子化)及统计物理教程的知识为基础。对超出上述知识范围以外的必要理论概念,本书有较系统的介绍。物理学各分支之间有着极为密切的联系,概念、方法往往彼此借鉴、移植。对一个问题的研究也涉及多个分支,这一点在本书多个章节中有所反映。为了便于读者阅读有关参考书籍,在有关章节中列出了本书涉及较多的专著或会议文集。

本书的读者对象是物理学的研究者。在国际上往往通过学术会议、高等进修班或讲座的出版物对一些研究前沿进行较系统的报道。这些书籍或会议记录专业性很强,水平也较高,对初次接触这些内容的研究者,特别是高年级本科生和研究生会有不少困难。希望本书能帮助他们缩短进入研究工作的过程。

有关量子理论的书,公式推导占了相当篇幅。本书在推导中着重说明了推导的目的性、采取的关键步骤和必要的细节,以期读者不致为太多的“可以证明”且并不理解的“显然”所苦恼。物理学中重要概念的发展往往有一个过程,有的过程甚至是很曲折的。许多概念往往在物理学各分支出现,它们具有同一个根源。本书尽量不只用定义引入概念,尽可能从发展和概念的相互关系上做必要的说明。量子力学的创立与初期的发展是建立在实验基础上的。近年来,一些深刻的基础概念和多年的争论都通过许多高水平的实验所澄清或取得了更为深刻的认识。这些实验在人们面前打开了一片又一片的新天地。尽管描述实验不是我们所长,但还是努力介绍其设计构思及采用方法的精妙,并阐明这些实验对深入理解理论、澄清争论问题所起的作用和意义,希望读者能了解到现象背后的物理实质。

本书第1章至第10章由张礼执笔,第11章至第13章由葛墨林执笔。作者二人一起详细讨论了全书的指导思想和章节编排,并共同审定了各章内容。以我们的水平和能力,要想实现本书设定的目标,势必捉襟见肘,会有不少缺陷和错误。诚恳希望各位专家和读者提出批评改进意见。

张 礼

清华大学物理系 清华大学高等研究中心

葛墨林

南开大学数学研究所 清华大学高等研究中心

1999年11月15日

## 关于第 3 版的说明

自本书第 1 版出版以来,十几年间积累的许多新的重要内容,使量子力学的理论不断深化。在本书第 2 版中,除了在相应章节中补充了相应标题的内容外,还增加了一章“量子缠绕及其在量子信息和量子计算的应用”。本书第 2 版于 2012 年 3 月出版。又过了十年,新的重要内容大量涌现,只能择要将其增补在各章节中,这就形成了篇幅足够大的第 3 版。

本书第 3 版在出版的过程中投入了相当长的时间,力图将前两版中的存疑尽可能地修改,并使新增的重要内容得以展现。量子物理学科的发展日新月异,书中难免存在错误和疏漏,殷切希望本书的读者给予理解、指正。

作者

2022 年 8 月



# 目 录

第 1 章 波动、粒子二象性,并协原理,贝尔定理及有关实验 .....	1
1.1 电子干涉图像的累积 .....	2
1.2 并协原理的原子干涉仪验证 .....	5
1.3 并协原理的量子光学验证.....	11
1.4 单光子干涉实验.....	14
1.5 多粒子干涉学.....	18
1.5.1 二粒子双缝干涉学 .....	18
1.5.2 下转换光子干涉实验 .....	20
1.5.3 发射时间的干涉 .....	22
1.5.4 相干与路径可区分性 .....	23
1.6 双光子干涉仪量子涂消器.....	26
1.7 爱因斯坦和玻尔关于量子力学的争论,贝尔定理 .....	32
1.7.1 1930 年爱因斯坦对量子力学的批评:“量子力学是不自洽的。” .....	32
1.7.2 Einstein-Podolsky-Rosen 佯谬:“量子力学描述是不完备的。” .....	33
1.7.3 贝尔定理 .....	35
1.7.4 推广到现实系统的贝尔不等式 .....	37
1.8 贝尔不等式的实验验证.....	38
1.9 惠勒的推迟选择实验.....	43
1.10 不涉及不等式的贝尔定理 .....	45
1.10.1 三粒子完全关联 .....	45
1.10.2 不涉及不等式的贝尔定理:二粒子情况 .....	48
1.10.3 二粒子体系不涉及不等式贝尔定理的实验验证 .....	51
1.10.4 三光子纠缠态的实验实现和对定域实在论的否定 .....	52
1.10.5 在缠绕与非定域性意义下的 EPR 佯谬.....	56
1.10.6 单光子的非定域性 .....	57
1.11 量子非破坏性实验简介 .....	59
1.11.1 标准量子极限与反作用回避实验 .....	60
1.11.2 量子非破坏性实验 .....	62
参考文献 .....	62

<b>第 2 章 量子缠绕及其在量子信息和量子计算的应用</b> .....	66
2.1 量子计算简介 .....	66
2.1.1 量子数据和数据处理 .....	66
2.1.2 量子并行性与有效量子算法 .....	67
2.1.3 量子信息 .....	69
2.2 量子缠绕 .....	71
2.2.1 缠绕态的密度矩阵表征 .....	71
2.2.2 施密特分解 .....	73
2.2.3 EPR-Bell 态的进一步讨论 .....	75
2.3 缠绕在量子信息学的应用 .....	77
2.3.1 致密编码 .....	77
2.3.2 量子密码学, EPR 量子钥分布 .....	77
2.3.3 量子非克隆定理 .....	79
2.3.4 量子远程传态 .....	79
2.4 六光子单态——免退相干态之一例 .....	81
2.5 本章小结 .....	82
参考文献 .....	83
<b>第 3 章 量子力学中的几何相</b> .....	86
3.1 阿哈罗诺夫-玻姆效应 .....	86
3.2 阿哈罗诺夫-玻姆效应的实验验证 .....	90
3.3 阿哈罗诺夫-卡舍尔效应 .....	94
3.4 平行输运, 联络, 曲率和非完整性 .....	96
3.5 贝利相 .....	99
3.6 阿哈罗诺夫-阿南丹相 .....	104
3.7 贝利相的实验显现 .....	106
3.7.1 光子贝利相的量子干涉现象 .....	107
3.7.2 螺旋磁场中中子自旋旋转的贝利相实验 .....	108
3.7.3 自旋绝热旋转造成的核四极共振频率分裂 .....	109
参考文献 .....	111
<b>第 4 章 量子力学与经典力学的界限, 缠绕与退相干</b> .....	113
4.1 薛定谔的谐振子波包, 相干态 .....	115
4.1.1 相干态的基本性质 .....	116
4.1.2 正则相干态 .....	117
4.2 氢原子圆轨道波包与径向波包 .....	120
4.3 氢原子的 $SO(4)$ 对称性, LRL 矢量, 开普勒椭圆轨道波包 .....	125
4.3.1 经典开普勒运动的 LRL 矢量 .....	126
4.3.2 量子力学中的 LRL 矢量, 动力学对称与氢原子能级 .....	127

4.3.3 开普勒椭圆轨道波包的构成	130
4.3.4 量子力学中的卢瑟福原子	133
4.4 波包恢复和分数恢复	138
4.5 态叠加原理与量子退相干	140
4.6 与环境相互作用导致的退相干	144
4.7 一个退相干的动力学模型	147
4.8 量子动力学的经典极限	149
4.9 实验室中实现的“薛定谔的猫”	152
4.9.1 单原子级的“薛定谔的猫”	152
4.9.2 薛定谔的位相猫	157
4.9.3 宏观“薛定谔的猫”	160
4.9.4 热辐射发射造成的退相干	162
4.10 波函数塌缩和量子芝诺效应	163
4.11 压缩算符和压缩相干态	165
参考文献	167
<b>第 5 章 路径积分方法, 衰变态的瞬子方法</b>	170
5.1 量子力学中的路径积分方法	170
5.2 瞬子与双阱中能级的相干劈裂	177
5.3 密度矩阵与路径积分	181
5.4 衰变态的瞬子方法	187
5.4.1 “二次加三次”势的隧穿	191
5.4.2 计算路径积分二次变分的平移法	196
5.4.3 谐振子前置因子的另一种算法	197
参考文献	199
<b>第 6 章 宏观水平上的量子力学</b>	200
6.1 具有宏观意义的波函数	200
6.2 耦合超导体, 约瑟夫森效应	205
6.3 置有约瑟夫森结的超导环——SQUID	209
6.4 约瑟夫森体系的宏观量子隧穿和宏观量子相干	213
6.5 环境对宏观量子现象的影响	217
6.5.1 关于正则变换和绝热近似	218
6.5.2 有耗散的电磁体系的哈密顿量	219
6.5.3 非绝热性的修正, 耗散体系的微观拉格朗日量	221
6.5.4 微观参量与宏观耗散参量的关系	224
6.5.5 耗散与宏观量子隧穿	225
6.5.6 耗散与宏观量子相干	229
6.6 有关约瑟夫森结的宏观量子隧穿实验	232

6.7	磁的宏观量子隧穿,自旋相干态	234
6.8	单畴铁磁粒子的宏观量子现象	237
6.8.1	量子相干:能级隧穿劈裂	238
6.8.2	量子隧穿	239
6.8.3	量子干涉(拓扑淬灭)现象	240
6.9	单畴反铁磁粒子的宏观量子现象	243
6.10	磁体系的宏观量子现象实验	246
6.11	磁性大分子的宏观量子现象	249
6.12	自旋奇偶效应的量子力学基础	251
	参考文献	254
<b>第7章</b>	<b>量子体系的拓扑相因子</b>	<b>259</b>
7.1	海森堡模型的自旋波理论	259
7.2	$O(3)$ 非线性 $\sigma$ 模型,对称自发破缺与戈德斯通定理	268
7.3	一维量子反铁磁链,拓扑相因子,到 $O(3)$ 非线性 $\sigma$ 模型的映射	270
7.4	Lieb-Schultz-Mattis 定理	275
7.5	拓扑项的意义	277
7.6	非阿贝尔规范场的 $\Theta$ 真空	279
7.6.1	非阿贝尔规范场	279
7.6.2	规范变换的等价类	281
7.6.3	$\Theta$ 真空	282
7.7	拓扑项与反常	284
	参考文献	286
<b>第8章</b>	<b>腔量子电动力学,范德华力和卡西米尔效应</b>	<b>288</b>
8.1	辐射场与原子相互作用	289
8.1.1	原子中电子场的量子化	289
8.1.2	辐射场的量子化	289
8.1.3	电子场与辐射场的相互作用,自发辐射率	290
8.1.4	暗态,电磁诱发的透明性	292
8.2	杰恩斯-卡明斯模型	298
8.2.1	耦合原子-腔体系的本征态	299
8.2.2	非共振情况下的原子能级光能移	301
8.2.3	态随时间的演化	303
8.3	自发辐射的抑制与加强	303
8.4	微脉泽	306
8.5	逆斯特恩-盖拉赫效应	308
8.6	原子-腔色散相移效应	309
8.6.1	单光子的量子非破坏探测,单光子的诞生及死亡的量子非破坏探测	312

8.7	腔量子电动力学中的缠绕态 .....	316
8.8	体系对外来扰动的响应和涨落-耗散定理 .....	317
8.8.1	电容率对频率的依赖,克拉默斯-克勒尼希色散关系 .....	318
8.8.2	涨落的关联与广义极化率 .....	320
8.8.3	涨落-耗散定理 .....	322
8.9	范德华相互作用 .....	325
8.10	考虑推迟的范德华相互作用 .....	327
8.10.1	振荡偶极子的场 .....	327
8.10.2	在均匀介质中电磁场的涨落 .....	329
8.10.3	卡西米尔-波尔德相互作用 .....	331
8.11	零点能,场真空涨落与范德华相互作用 .....	333
8.12	卡西米尔效应 .....	338
8.13	强耦合机制下的腔量子电动力学 .....	340
8.14	辐射修正 .....	344
8.14.1	自发辐射修正:自由电子 .....	344
8.14.2	自发辐射修正:束缚电子 .....	345
8.14.3	受激辐射修正 .....	346
8.15	与单色辐射相互作用,布洛赫球和光移 .....	346
8.16	量子场论中的重整化 .....	350
8.17	重整化群方法 .....	353
8.17.1	重整化群流 .....	353
8.17.2	不同能量标度的物理学 .....	355
8.17.3	安德森局域化 .....	356
8.17.4	相变之路,临界现象 .....	357
8.17.5	$d$ 维中 $O(n)$ 非线性 $\sigma$ 模型,弱耦合近似 .....	360
	参考文献 .....	364
<b>第 9 章</b>	<b>量子霍尔效应 .....</b>	<b>367</b>
9.1	经典霍尔效应 .....	367
9.2	电子在均匀磁场中的运动,朗道能级 .....	368
9.3	磁通量子化 .....	372
9.4	整数量子霍尔效应 .....	373
9.5	分数量子霍尔效应,劳格林波函数 .....	382
9.5.1	少数电子的量子化运动 .....	384
9.5.2	$\nu=1/m$ 态的劳格林波函数 .....	387
9.5.3	准粒子激发 .....	390
9.5.4	不可压缩量子流体的集体模式 .....	392
9.5.5	分数量子霍尔流体的无能隙边缘态 .....	397

9.5.6	分数量子霍尔效应的等级态	400
9.5.7	复合费米子杰恩构造法	401
9.6	分数量子霍尔效应的朗道-金兹堡理论	402
9.6.1	张首晟-汉松-克沃尔森映射,陈-西蒙斯-朗道-金兹堡作用量	402
9.6.2	平均场解,分数量子霍尔效应现象学	405
9.6.3	代数非对角长程序	407
9.6.4	分数量子霍尔流体的拓扑序	409
9.7	量子霍尔效应的整体相图	411
9.8	量子自旋霍尔效应	416
9.9	2+1 维物理中的拓扑,反常霍尔效应	420
9.9.1	3+1 维手征反常	420
9.9.2	与规范场耦合的 2+1 维狄拉克场	422
9.9.3	拓扑非平凡的具有反常宇称的真空流	423
9.9.4	分数电荷、真空流和零模的关系	424
9.9.5	2+1 维反常的凝聚态模拟	426
9.9.6	反常霍尔效应	429
9.10	凝聚态物理中的拓扑,拓扑绝缘体和超导体	432
9.10.1	量子自旋霍尔绝缘体,拓扑分类	432
9.10.2	拓扑超导体,马约拉纳费米子	437
9.10.3	外尔点和费米弧	440
	参考文献	443
<b>第 10 章</b>	<b>玻色-爱因斯坦凝聚</b>	<b>448</b>
10.1	玻色-爱因斯坦凝聚的一些基本关系	449
10.1.1	BEC 本质上是量子统计现象	449
10.1.2	玻色-爱因斯坦温度	450
10.1.3	玻色气体的热力学性质	451
10.2	玻色-爱因斯坦凝聚的序参量与非对角长程序	457
10.3	玻色-爱因斯坦凝聚的本质:对称自发破缺和相位相干性	458
10.4	弱相互作用玻色气体:均匀凝聚体	466
10.4.1	波戈留波夫弱相互作用玻色气体理论	466
10.4.2	非理想玻色气体	471
10.5	弱相互作用玻色气体:非均匀凝聚体	472
10.5.1	凝聚性质与外场的关系	472
10.5.2	阱中弱相互作用玻色气体的玻色-爱因斯坦凝聚	475
10.5.3	格罗斯-彼得耶夫斯基方程	478
10.5.4	量子相位动力学	479

10.6	各向异性势阱中的玻色-爱因斯坦凝聚 .....	483
10.7	涡旋及玻色-爱因斯坦凝聚体的稳定性 .....	485
10.8	旋量凝聚体 .....	488
10.8.1	基态结构 .....	490
10.8.2	阱中旋量凝聚体的集体模 .....	491
10.8.3	铁磁态涡旋的内在稳定性 .....	492
10.8.4	无核的涡旋 .....	493
10.8.5	碎裂的凝聚体 .....	494
10.9	在光晶格中的冷玻色原子 .....	497
10.10	费什巴赫共振和共振超流性 .....	504
10.10.1	费什巴赫共振 .....	505
10.10.2	简并费米气体 .....	507
10.10.3	费米原子组成分子和分子的 BEc .....	508
10.10.4	费米原子对的凝聚体 .....	510
10.11	作用于冷中性原子的人造规范场 .....	514
10.12	超冷原子的人造自旋-轨道耦合 .....	517
10.13	叶菲莫夫态物理和檀时钠关系 .....	520
10.14	周期驱动光晶格中的超冷原子 .....	525
	参考文献 .....	540
<b>第 11 章</b>	<b>量子力学中的 Yangian 对易关系 .....</b>	<b>546</b>
11.1	氢原子的张量算符与 Yangian .....	546
11.2	Yangian 代数 .....	549
11.3	$Y(SL(2))$ 在量子力学中的其他实现 .....	552
11.4	长程相互作用的一维链模型 .....	556
11.5	哈伯德模型 .....	560
11.6	$SL(3)$ 一维表示和八维表示间的 Yangian 跃迁 .....	564
	参考文献 .....	567
<b>第 12 章</b>	<b>RTT 关系与杨-Baxter 方程 .....</b>	<b>568</b>
12.1	对易关系的矩阵直积形式 .....	568
12.2	RTT 关系 .....	574
12.3	杨-Baxter 方程 .....	576
12.4	守恒量集合, 哈密顿量 .....	578
12.5	量子行列式, 余乘法 .....	583
12.6	RTT 关系展开式与对易关系 .....	589
12.7	氢原子与 RTT 关系 .....	591
12.8	Yangian 的表示和氢原子能谱 .....	594
12.9	Yangian 和贝尔基 .....	599
12.10	S-波到 P-波超导的转变 .....	601
12.11	量子代数 .....	604

12.12	双频谐振子与量子代数对易关系	607
12.13	相干态平移算符与量子代数	609
12.14	相位量子化的可能性与量子代数的循环表示	613
	参考文献	617
<b>第 13 章</b>	<b>杨-Baxter 方程与量子信息</b>	<b>620</b>
13.1	贝尔基与辫子群	620
13.2	杨-Baxter 方程的新型解与连续纠缠态	621
13.3	量子信息相关的哈密顿量	622
13.4	拓扑基下的杨-Baxter 方程与维格纳 $D^{j-}$ 函数的关系	623
13.5	$\ell_1$ -模的极值与最大纠缠度	627
13.6	杨-Baxter 方程的马约拉纳费米子表示	629
13.7	马约拉纳二重简并与整体 $\Gamma$ 对称性	631
	参考文献	634

# 第 1 章

## 波动、粒子二象性,并协原理,贝尔定理及有关实验

围绕量子力学的基本原理问题自 1925 年量子力学创建起就一直存在争论。随着实验工作和理论工作水平的不断提高,一些具体争议被解决了,但新的问题又提了出来,争论在更高的水平上进行着,在研究前沿上不断出现新的成果。

物质的波动、粒子二象性是量子力学的基础,电子和中子在晶体上的衍射早已为人所知。1961 年 C. Jönsson 做了电子双缝(以及三缝、四缝)衍射实验。量子力学教程中为了讲清概念,多用双缝衍射为例说明。在双缝衍射中涉及的基本概念包括:①电子落在屏幕上作为粒子个别落下的。应该能演示在开始时电子落在屏幕上如夜空随机分布的点点星体,然后逐渐显出干涉条纹的极大和极小。条纹极大代表落在该处电子数目最多,而这个概率分布是由波函数确定的。②狄拉克(Dirac)在他的《量子力学原理》中指出,电子是自己和自己干涉。一定要允许它(一个电子)从两个缝通过才会有干涉发生。在实验上要演示这一点,要创造条件,在任何时间只能有一个电子处于狭缝与屏幕之间。在 20 世纪 80 年代末以前,要达到观察干涉条纹的积累过程以及保证在仪器中只能存在一个电子的条件是困难的。

1.1 节介绍的殿村(A. Tonomura)在 1989 年所做的实验满足了以上要求。

光的双缝实验是 19 世纪初托马斯·杨(Thomas Young)首创的。从光的波动性讲,理解是很直接的。但如果按照二重性的观点把光也看成光子时,理解的难度和上文讨论的电子双缝实验一样,即一个粒子如何同时通过两个狭缝。更有甚者,常用的光源,包括激光器在内,都属于“经典光源”,无法保证在一个光子通过仪器时没有第二个光子存在,不论光源是多么弱。

1.4 节介绍的单光子干涉实验(1986 年,Aspect)尝试解决与经典光源相联系的困难。

近年来,出现的“多光子干涉学”,实际上是演示一对关联的光子自己和自己的干涉现象,并且体现了单光子干涉与双光子干涉现象不能并存,这些都加深了对量子力学的理解。

1.5 节将对此作出介绍。

处于量子力学原理争论核心的还是并协原理。它包括若干相互联系的问题。电子通过双缝能发生干涉,是因为给它提供了两条路径的选择可能,这样它才会显示波动性。如仍开放两条缝,但用光把缝照亮,使电子通过时能够“看见”它从哪一个缝通过——使它显出粒子性,这时条纹便会消失。这是量子力学的并协原理预言的,但果真如此吗?该实验被称为“想象中的实验”,意思是实际上是没法做的实验。其困难在于,光和电子的相互作用太弱。即使用光照亮狭缝,虽然绝大多数电子是通过了,却未被发现。现在,“想象”已变成了现实。如果用原子代替电子,并用调谐好的共振光进行照射,那么相互作用就足够强以至于原子难

以漏网(1995年,Pritchard),便可以证实量子力学的预言。用光驻波作为衍射栅进行的原子干涉仪实验(1998年,Rempe等人)也对此明确给予了验证。我们将在1.2节介绍这些发展。

另一个有关的问题是:电子显示的波动性为什么在被光照射时会遭到破坏?过去的标准解释往往是,如果要观测它,例如用光照一下,光子在它上面散射时会改变它的动量。这类相互作用是无法控制的,因为光散射是概率过程,且给它的动量也是有一个分布的。在一些情况下,这会是主要原因,但不同情况也会有不同机制。例如在1.2节普里查德(Pritchard)的实验中,造成干涉损失的原因是光子散射造成的有效相移,这个有效相移是可以实验控制的。有效相移加大,干涉条纹对比度减小。伦佩(Rempe)通过实验表明,路径与原子的可观察性质(在此情况下是原子的内部状态)的缠绕是干涉丧失的原因。传统的解释源于对海森堡(Heisenberg)不确定性原理的物理分析。其更“标准”的译法是“测不准原理”。是不是不测就可以准呢?1.6节将介绍的量子光学中微脉泽实验就避免了这种“不可控制的相互作用”,通过电子与光子自由度的关联(缠绕)而导致相干丧失;同样,如果抹去这个关联,相干就会恢复。1.6节的量子涂消器将介绍这个内容。

费曼(Feynman)说过:“只有在一个装置中无法在物理上互相区分的状态才能干涉。”邹兴宇、王力军和曼德尔(Mandel)的实验表明,只要实验不提供区分的可能性,便有干涉,但若实验提供可能,甚至不必放探测器去实测,干涉就消失了(见1.5.4节)。

有一种说法,量子客体如何表现(例如表现波动性或粒子性)关键在于它如何“感知”测量装置的情况。你用一种方法,它根据装置的信息决定呈现波动性或粒子性。1978年惠勒(J. A. Wheeler)提出一个妙法,叫“推迟选择实验”,大意是:先设定好条件,等客体已经通过了设备(表现已经确定),在探测它之前,再突然改变条件,看结果如何。本章中不止一个实验涉及推迟选择,如1.9节所述。当然,客体的行为只和最终的实验条件有关,它不会根据信息预做准备。

在所有的争论中,显然最著名的是爱因斯坦(Einstein)和玻尔(Bohr)的争论,或称“Einstein-Podolsky-Rosen(EPR)佯谬”。对于量子力学对微观客体性质做出的实验预言,早已没有什么异议,量子力学已经在科学和工程中大量、广泛地应用,并且很成功。爱因斯坦的挑战是,量子力学的描述是不完备的,即客体的性质比量子力学能描述得要多。多年来,许多研究人员打算去挖掘这种潜藏的可能。有的失败于不能自洽,但有的好像不无道理。这后面一类理论有一个共同名称叫“隐变量”理论,也叫“定域实在性”理论,对于它的争论十分激烈。1965年贝尔(Bell)提出了一个定理:定域实在性理论如果要和量子力学做出同样的预言,它就必然要满足一个不等式。这就为争论提供了一个极明晰的判据。从20世纪60年代后期起,一大批实验投入了不等式的验证,结果越来越精确地验证了不等式被破坏。从那时起过了30多年,争论一直没有停止。原因是任何一个实验都几乎不可能没有“漏洞”,于是便有人提出异议。近代物理学的实验方法的确使人叹服,目前已能使贝尔不等式的破坏超过了100个标准偏差。但这还不算完结,最近又出现了不涉及不等式的贝尔定理,用实验直接反驳“定域实在性”理论。这些将在1.7节~1.10节讨论。

## 1.1 电子干涉图像的累积

在量子力学教科书中常用电子双缝实验说明电子的波动性。在实验中电子通过狭缝落在屏幕上,被探测器逐个记录,星星点点地积累起来的电子逐渐形成干涉图像,干涉图像是

由两个狭缝的波  $\psi_1$  和波  $\psi_2$  叠加而形成的,其在屏幕上的强度和  $|\psi_1 + \psi_2|^2$  成正比。形成干涉图像的条件是电子的德布罗意波长要大于双缝距离,波的相干长度要大于两条干涉路径的程差,并且不对电子通过哪一个狭缝进行测量。如进行这类测量(例如在一个狭缝附近放置光源或使狭缝平面自由悬挂),则在屏幕上记录的只是电子通过两个单狭缝图像的和,即  $|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2$ 。费曼<sup>[1]</sup>指出,“这是绝对不能用任何经典方式解释的。在其中包含了量子力学的核心。”“实际上它包含了唯一的奥秘。”他还指出,“这个实验尚没有实际进行过,因为仪器的尺度需做得无法实现地小。”原因是电子束的能量必须足够单一,而满足要求的电子束能量就显得太大,其德布罗意波长就比双缝的尺度小太多。这类实验被称为“想象中的实验”<sup>①</sup>,书中的实验是为了说明(而非证实)量子力学的基本原理。

塞林格(A. Zeilinger)<sup>[2-3]</sup>等人实现了中子干涉图像的积累形成。他们采用速度相当于 200m/s 的极冷中子,波长为 2nm。两个狭缝的宽度为  $22\mu\text{m}$  和  $23\mu\text{m}$ ,间距为  $104\mu\text{m}$ 。探测平面在狭缝平面下游 5m 处。所得干涉图样如图 1.1 所示。衍射实线代表理论预言(已经考虑了仪器的具体条件)。此外,观测到的中子强度低到平均 2s 1 个计数。实验演示了显出波动性的干涉图样实际上是由中子一个接一个落于观测平面上形成的,而且在中子单独通过仪器时是自己和自己干涉。

为了克服费曼提到的实验观测的困难,殿村等人<sup>[4]</sup>用配置了电子双棱镜的电子显微镜和位置灵敏电子探测系统实现了电子干涉图像的积累。电子双棱镜的工作原理如图 1.2 所示,双棱镜由两个平行接地的平板电极和一个半径为  $a$  的细丝组成,细丝与平板距离为  $b$ ,细丝处于正电势。静电场的势为  $V(x, z)$ ,入射波为  $e^{ik_z z}$ 。在有电磁场(其四维势为  $A_\mu$ )存在时的波函数  $\psi$  和在没有电磁场存在时的波函数  $\psi_0$  的关系是<sup>②</sup>

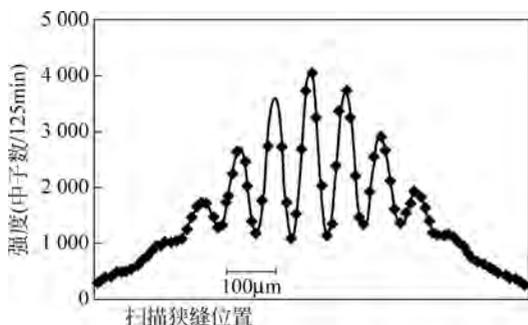


图 1.1 极冷中子的双缝衍射图样

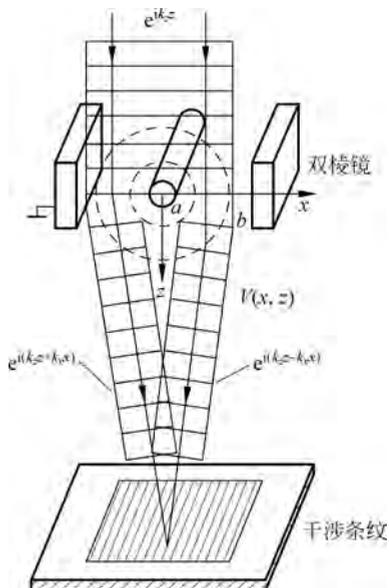


图 1.2 电子平面波通过双棱镜产生干涉条纹

① thought experiment, 多译为“理想实验”。更确切的译法为“想象中的实验”,因为它们曾被认为是不可能实现的。

② 请参阅本书 3.1 节。

$$\psi(\xi) = \exp\left(-\frac{ie}{\hbar} \int^{\xi} A_{\mu}(\eta) d\eta^{\mu}\right) \psi_0(\xi) \quad (1.1.1)$$

指数上的积分是从任一参考点积至  $\xi$ ,  $\xi$  与  $\eta$  均为四维时空坐标。四维势在此处只有标量分量  $A_0 = V(x, z)$ , 而势  $V(x, z)$  对坐标  $x$  是对称的, 因此积分为

$$\int V(x, z) dt = \int V(x, z) \frac{ds}{v_z} = \frac{m}{\hbar k_z} \int V(x, z) ds$$

此处  $v_z = \frac{\hbar k_z}{m}$  是电子的速度,  $ds$  为线元。取参考点为  $z = -\infty$ , 式(1.1.1)中的相因子为

$$\exp\left(-\frac{iem}{\hbar^2 k_z} \int_{-\infty}^z V(x, z') dz'\right)$$

进入双棱镜的电子波函数为

$$\psi(x, z) = \exp i\left(k_z z - \frac{em}{\hbar^2 k_z} \int_{-\infty}^z V(x, z') dz'\right) \quad (1.1.2)$$

电子在通过时的受力基本是在  $x$  方向, 其大小为  $-e \frac{\partial V}{\partial x}$ 。将  $V$  在  $x=a$  附近展开 ( $x \geq a$ ) 得

$$V(x, z') = V(a, z') + \left. \frac{\partial V(x, z')}{\partial x} \right|_{x=a} x$$

对于  $x \leq -a$ , 有  $\frac{\partial V(-x, z')}{\partial x} = -\frac{\partial V(x, z')}{\partial x}$ 。对  $x \geq a$ , 通过双棱镜的电子波函数是

$$\psi(x, z) = \exp i\left(k_z z - \frac{em}{\hbar^2 k_z} \int_{-\infty}^z V(a, z') dz' - x \left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{x=a} dz'\right)$$

括号中的第二项与  $x$  无关, 归结为只与  $z$  有关的相因子。在电子通过后, 获得在  $x$  方向的动量是(记它为  $-\hbar k_x$ )

$$\int dt \left(-e \frac{\partial V}{\partial x}\right) = \int dz' \frac{m}{\hbar k_z} \left(e \frac{\partial V}{\partial x}\right) = -\hbar k_x$$

故  $\psi(x, z)$  右方括号中的第三项实际上是  $-k_x x$ 。最后得到

$$\psi(x, z) = \exp i(k_z z \mp k_x x + \phi(z)) \quad (1.1.3)$$

符号“ $-$ ”适用于  $x > a$ , 符号“ $+$ ”适用于  $x < -a$ 。两束波会聚后总的波函数为

$$\psi(x, z) = e^{i(k_z z + \phi(z))} (e^{-ik_x x} + e^{ik_x x})$$

干涉图像由下式给出

$$|\psi(x, z)|^2 = 4\cos^2 k_x x \quad (1.1.4)$$

对圆柱状细丝, 在它附近的静电势为

$$V(x, z) = V_a \frac{\ln(\sqrt{x^2 + z^2}/b)}{\ln(a/b)}$$

此处  $V_a$  为丝上的电势。从  $k_x$  的定义式可得

$$k_x = \frac{\pi e V_a}{\hbar v_z} \ln \frac{b}{a} \quad (1.1.5)$$

由实验装置的参数所确定的干涉条纹距离  $d = \frac{\pi}{k_x}$  很小, 不能直接观察。用电子光学技术, 可以在电子显微镜的像平面之后再加两个投影透镜将条纹距离  $7000 \text{ \AA}$  ( $1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$ )

放大 2 000 倍,达到 1.4mm,再采用位置灵敏的电子记录技术。电子在屏幕上的累积过程如图 1.3 所示。实验中电子到达探测平面的数目约为  $10^3$  个/s,从电子源(场发射尖端)到屏幕的距离为 1.5m,电子速度为  $1.5 \times 10^8$  m/s。如果电子是均匀发射的,则两个电子间的平均距离是 150km,电子波包的长度只有  $1\mu\text{m}$ 。因此同时有两个电子位于棱镜区域的概率极小,波包重叠的可能性极小。实验记录 20min 就可以出现干涉条纹,最初的电子像是无规则地出现在探测平面各处,在电子总数达到 3 000 时初步呈现条纹的图像,最后在电子总数达到 70 000 时有 5 个条纹清晰可见。

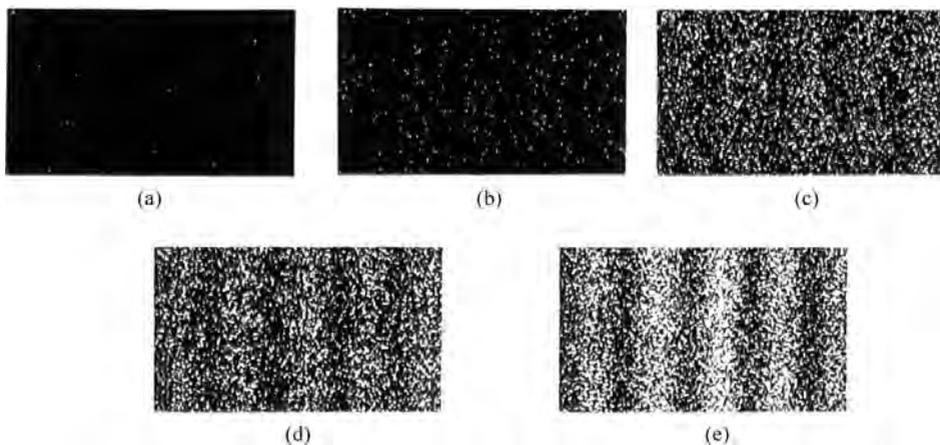


图 1.3 电子在屏幕上累积  
取自文献[4],由殿村教授提供

这个实验清楚地显示了电子的波粒二象性。单个电子通过双缝的波产生干涉条纹,而在探测器中电子是作为定域的粒子被记录的,它在探测平面某位置上出现的概率由式(1.1.4)确定。

费曼进一步分析,如果用光照一下某一个狭缝以便判定电子是否从这个狭缝通过,干涉条纹就不会产生。

可以定性地理解如下:在狭缝平面下游电子波函数为

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_a + \psi_b)$$

此处  $\psi_a$  和  $\psi_b$  分别代表通过狭缝  $a$  和狭缝  $b$  的波。衍射图样取决于  $\psi_a$  和  $\psi_b$  在屏幕上不同点处的相位差。探测电子通过情况的光子在两波之一上散射,否则就得不到电子通过的信息。散射会改变  $\psi_a$  或  $\psi_b$  的相位,而改变是概率性的。因此,衍射图样会被抹匀,可见度降低甚至消失。

这个实验的“想象”程度很高,实际上能实现吗?在 1.2 节中将介绍实验物理学家是如何使它成为现实的。

## 1.2 并协原理的原子干涉仪验证

双缝实验提供的关于微观世界的认识是和经典物理完全不同的。如果要干涉条纹(波动性质显露),就不可能确定电子通过的是哪个狭缝。如果要判断它通过了哪个狭缝(提供有关路径的信息,即粒子性质显露),干涉条纹就会消失。这个认识由玻尔在 1927 年总结为

并协原理(互补原理)。一个粒子的位置描述和动量描述可以看作量子状态的互补描述。在量子力学中不能像在经典力学中那样同时用这两个力学量给出运动轨迹。狄拉克称这个新的观点会“导致物理学家的世界观急剧地变化,也许是迄今发生的最大的变化”。玻尔不倦地通过各种演讲、会议、文章阐明这个原理是微观世界的现实,他的努力遇到很大的困难。开始时反对者众多,其中最具权威的是爱因斯坦(参阅 1.7 节)。可见如能直接在实验上演示它的正确性,意义是十分重大的。用电子或中子干涉仪实现费曼这个“想象中的实验”,困难在于电子及中子和光的相互作用都很弱。普里查德领导的研究组在麻省理工学院(MIT)用原子干涉仪实现了这个实验<sup>[5]</sup>。他们用共振光照射干涉仪中的原子,正像费曼指出的那样,如果光子的散射能向散射它的原子提供在干涉仪中走“哪一条路径”<sup>①</sup>的信息,原子的波动性质即被毁灭,而表现为粒子。但若由光子散射所引起的两条原子的路径程差小于光的波长的一半,散射的光子就不能提供散射原子的路径,波动性质就能保留。这个研究组进一步辨明了,如果只探测散射方向在一定窄范围内的光子,失去的干涉图像还能恢复,代价是这些散射光子并不能提供散射原子走“哪一条路径”的信息。实验结果明确地说明,并不是光子散射带来的干扰本身毁灭了波动性。光子散射是否毁灭波动性,在于它是否提供原子走“哪一条路径”的信息。相干的损失根源不在于光子所传递的动量,而在于随机的相移。这点将在下面详细讨论,这是并协原理十分直接的演示。

超声惰性气体流载带的钠原子(速度均匀度达均方根误差小于 4%)被  $\sigma^+$  偏振的激光泵浦到  $F=2, m_F=2$  态上。用 Stern-Gerlach 分析磁体证实,泵浦率达 95%。原子束经两个狭缝准直,进入由三个光栅(纳米工艺制造)组成的 Mach-Zender 干涉仪。图 1.4 中的垂直点线代表光栅,  $L$  为相邻光栅距离。原子在干涉仪中  $z=0$  处的分束、 $z=2L$  处的复合以及在  $z=2L$  处的反射是通过在光栅上的透射和布拉格(Bragg)反射实现的,原子束以布拉格角入射在第一光栅上。干涉条纹由  $\bar{N}[1+C\cos(k_g x)]$  给出。此处  $k_g=2\pi/\lambda_g, \lambda_g$  是光栅的周期;  $\bar{N}$  是平均计数率;  $C$  为干涉图像的对比度,也称“可见度”(visibility)。图 1.5 是实验的示意图。用  $\sigma^+$  偏振光(光子动量  $k_i$ )将原子共振激发到  $F'=3, m'_F=3$  的状态。共振激发保证原子与光的强相互作用是实现这个“想象中实验”的保证。原子经自发辐射动量为  $k_r$  的光子退激回基态。未经激光激发的原子在干涉仪中的路径由虚线(平行四边形)表示,原子在散射光子后的路径由实线表示。 $d$  代表在光子散射处干涉仪两臂间的距离。实验中干涉条纹对比度的损失将用  $d$  的函数衡量。

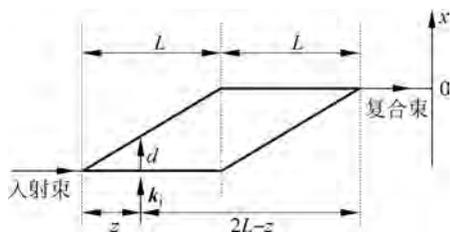


图 1.4 Mach-Zender 干涉仪中原子的路径

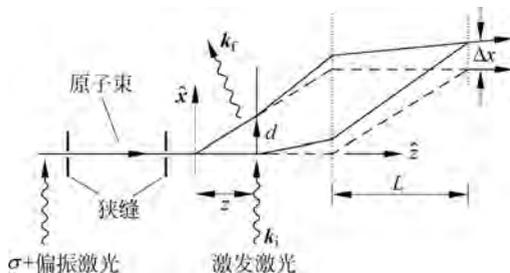


图 1.5 光子散射对原子干涉的影响

① 英文 which path 或德文 welcher Weg 已成为描述这类实验的专用名词。

令  $\lambda_g$  为光栅周期。在白干涉条纹几何(white interference fringe geometry)条件下,复合光栅起条纹的掩膜作用。没有光子散射时在复合光栅处的原子波函数是

$$\psi(x) \propto u_1(x) + u_2(x)e^{ik_g x}$$

此处  $u_1$  和  $u_2$  是上束和下束的振幅(均为实数),  $k_g = \frac{2\pi}{\lambda_g}$ 。光子散射造成的影响如下:

① 光子动量变化为  $\Delta k = k_f - k_i$ , 它的  $x$  分量记为  $\Delta k_x$ 。原子在散射光子后在  $x$  方向的动量变化的数值也是  $\Delta k_x$ 。因此干涉图像的包络线在  $x$  方向的移动是  $\Delta x = \frac{\Delta k_x}{k_A}(2L - z)$ ,

此处  $k_A$  是原子的动量, 它和原子的德布罗意波长  $\lambda_A$  的关系是  $k_A = \frac{2\pi}{\lambda_A}$ 。

② 沿干涉仪两臂的原子波相对相移变化  $\Delta\phi = \Delta k \cdot d = \Delta k_x d$ 。重要的是, 光子散射是量子过程, 因此  $\Delta k$  是有概率分布的。综合这两项影响后复合光栅处原子波函数改为

$$\psi'(x, \Delta k_x) \propto u_1(x - \Delta x) + u_2(x - \Delta x)e^{i(k_g x + \Delta\phi)} \quad (1.2.1)$$

如果观测所有的原子, 即不考虑散射光子动量  $k_f$  的方向, 则结果的干涉条纹应是相应不同相移  $\Delta k_x$  的干涉条纹的非相干叠加:

$$C' \cos(k_g x + \phi') = \int d(\Delta k_x) P(\Delta k_x) C \cos(k_g x + \Delta k_x d) \quad (1.2.2)$$

此处  $P(\Delta k_x)$  是横向动量传输的概率分布, 它由偶极辐射分布给出, 示于图 1.6 的右上方。当动量传输为 0 时相当于向前散射; 当其  $2\hbar k$  时相当于向后散射。动量传输的平均值  $\overline{\hbar\Delta k_x} = \hbar k$ 。  $C$  是无激光照射时干涉条纹的对比度。式(1.2.2)表明干涉图像对比度  $C'$  和相角  $\phi'$  作为  $d$  的函数是动量传输分布函数  $P(\Delta k)$  的傅里叶变换的大小和辐角。利用实验结果将使用激光时测得的条纹对比度  $C'$  与不用激光时的对比度  $C$  之比(相对对比度)以及相移作为  $d$  的函数绘于图 1.6。在实验中, 共振激发激光束沿  $z$  轴方向移动(图 1.5)给出不同

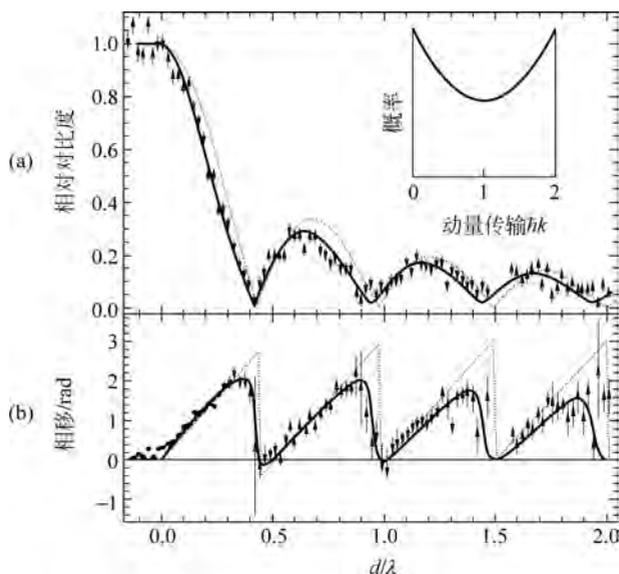


图 1.6 相对对比度和相移作为  $d$  的函数( $\lambda$  是激光波长)

的  $d$  值:  $d = z \frac{\lambda_A}{\lambda_g}$ 。若  $d < 0$ , 相当于  $z < 0$ , 即激光束位于第一光栅之前。从结果可以看到, 当  $d < 0$  或  $d > 0$  且  $d$  很小时, 光子散射对原子干涉的对比度和相位没有影响。对  $\overline{\Delta k_x} d \ll \pi$ , 相移随  $d$  线性增长。对各向同性散射  $\overline{\Delta k_x} = k = \frac{2\pi}{\lambda}$  ( $\lambda$  是激发激光的波长),  $\overline{\Delta k_x} d = 2\pi \frac{d}{\lambda}$ , 即平均相角随  $d/\lambda$  线性增长, 斜率为  $2\pi$ 。相应地, 相对对比度迅速下降。图中虚曲线对应单光子散射的理论计算, 实曲线为对实验点的最佳拟合。此处考虑了有 5% 的原子没有吸收光子 (未被泵浦激光带到  $F=2, m_F=2$  态), 另有 18% 的原子吸收了两个光子的实际情况。对比度随  $d$  的增加而急剧下降, 到  $\overline{\Delta k_x} d \approx \pi$  即  $d \approx \lambda/2$  时降至 0。当  $d$  再行增加时, 相角从 0 开始, 此时对比度部分恢复, 然后再随相角的增加而减少。这种趋势周期性重复。

有了以上结果, 就可以讨论一个重要问题: 相干损失 (或称“去相干”, decoherence) 的原因是什么, 或把问题提得更具有普遍性些, 是什么机制使并协原理成立。在经常讨论的例子中, 例如爱因斯坦提出的自由悬挂的双缝平面, 或费曼提出的用光照狭缝, 最终都是海森堡的动量-位置不确定关系破坏了相干条件。在这个实验中, 能够很自然地想到光子给予原子的动量传输。由于它引起干涉条纹在  $x$  方向移动以致最终把明暗抹平。在本实验中, 干涉条纹包围线的移动  $\Delta x$  正是代表这个效应 ( $\Delta x$  与  $\Delta k_x$  成正比)。实验的实际数值  $\Delta x$  相当于 100~200 个条纹, 它的变化很难说明条纹对比度的变化。相移  $\Delta\phi$  最多只相当于几个条纹。实际上, 当激光束位置向小的  $z$  值变化时, 对给定的  $k_f$ ,  $\Delta x$  有所增加, 而同时当  $z \rightarrow 0$  时, 相干损失和相移同步减小而趋于 0。因此, 光子散射造成的有效相移是和对比度损失直接关联的。

在上述实验中, 调整第三个光栅 (复合处的光栅) 的位置和宽度, 就能探测出从光子接受了不同动量传输的原子, 并把它们与光子的散射方向联系起来。实验结果示于图 1.7, 图中 I 代表光子基本是向前散射, II 相当于中间散射角, 而 III 代表基本是向后散射。探测器接收的  $\Delta k_x$  分布的  $P_i(\Delta k_x)$  ( $i = \text{I}, \text{II}, \text{III}$ ) 示于图 1.7(b) 的右上方, 虚线是各种  $\Delta k_x$  全部接收的分布。图 1.7(a) 是相对对比度, 图 1.7(b) 是相移。实线是根据实验具体几何条件计算的结果, 虚线是对全部原子 (不对  $\Delta k_x$  加以限制) 都探测的计算曲线。图 1.7(a) 中 II 的结果和 I 差别不大, 未在图中画出。I, II, III 限定的动量传输范围和相移曲线的斜率是相应的, 分别接近于  $0, 3\pi$  和  $4\pi$ 。从图 1.7(a) 可以看出对比度的下降比测量全部原子时慢得多。实际上当  $d \approx \lambda/2$  时, 对比度只降到约 60%。

这个结果显示, 测量和光子散射无关联和有关联的原子结果会如此不同。而光散射的条件和结果本来是一样的。被原子散射的光子可以有很多的终态  $k_f$ , 而原子也有很多与  $k_f$  一一对应的状态。散射后的原子-辐射场体系实际是以薛定谔纠缠态<sup>①</sup>表示的。原子-辐射场体系没有耗散, 是按照薛定谔方程演化的。原子的相干本来没有被消灭, 只是被缠绕在为数众多的末态库中了。众多末态按一定概率分布, 相移也随之按概率分布, 总的效果就是把干涉条纹抹平了。一旦大大限制末态的数量, 相干就会在一定程度上恢复。当然可以问,

<sup>①</sup> 设有两个体系 A 和 F (例如原子与辐射场), 发生相互作用以后总体系的状态用  $\sum_i A_i F_i$  表示, 而不能简单地用一个乘积  $AF$  表示, 这个线性组合被薛定谔 (Schrödinger) 称为“纠缠态” (entangled state), 他说, “缠绕不是量子力学的特征之一, 它就是唯一的特征。”

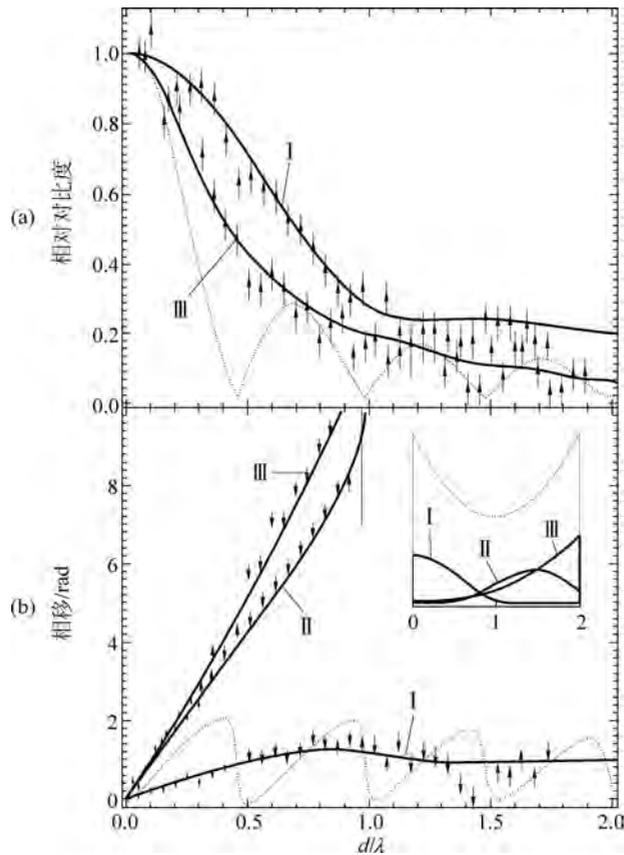


图 1.7 当探测与一定散射方向光子相关联的原子时干涉的相对对比度与相移

这个实验直接提供了走“哪一条路径”的信息了吗？原则上，测量散射光子的  $k_f$  可以提供相应原子的路径，在这个实验中并没有去测。因此，只要实验装置的安排（起决定性的是光子在原子上的散射）提供走“哪一条路径”信息的可能性，将粒子性推到前台，波动性就退隐了。

关于这一点，此后的一个原子干涉仪实验<sup>[6]</sup>给予了进一步的阐明。这是用<sup>85</sup>Rb 原子束做的“双狭缝”实验，只不过衍射栅由光的驻波构成。光频率  $\omega_0$  相对于原子激发态与基态能级差  $\Delta E$  有一定的失谐  $\Delta$ ， $\Delta = \omega_0 - \frac{\Delta E}{\hbar}$ 。驻波波节与波腹处光的强度  $I$  不同，从而对原子产生“光移势”（light shift potential） $U$ ， $U \propto \frac{I}{\Delta}$ <sup>[7]</sup>。在原子入射角度为布拉格角时，这个周期势使原子发生布拉格反射<sup>[8]</sup>。

在图 1.8 中，原子束 A 以布拉格角入射，光驻波将它分为透射束 C 与布拉格反射束 B，调整光的强度可以使驻波成为反射率为 50% 的分束器。经自由传播时间  $t_s$ ，两束到达第二个驻波时已经分开距离  $d$ ，它相当于双缝的距

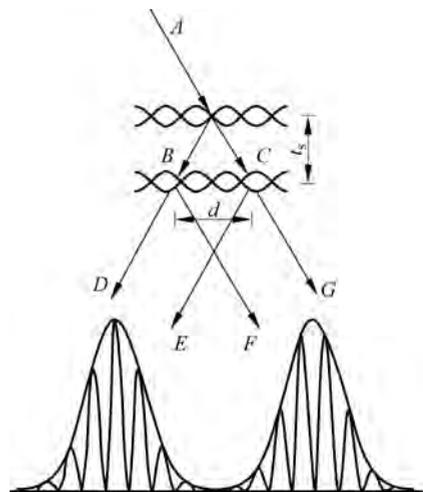


图 1.8 原子干涉仪示意图

离。通过第二个驻波时束  $B$  分为  $D$ (透射)和  $F$ (反射),束  $C$  分为  $G$ (透射)和  $E$ (反射)。同方向的原子束在远场发生干涉形成干涉条纹。由于入射束与分束器并不垂直,故干涉条纹在左右包络线下并不对称,左峰下的极大对应右峰下的极小。条纹间的距离取决于原子与驻波相互作用时间的长短(可以用光源的开与关控制),理论值与实验结果符合。

有关“哪一条路径”的信息可以储存在原子的内部状态中。如图 1.9 所示, $^{85}\text{Rb}$  原子激发态  $5^2\text{P}_{3/2}$  以  $|e\rangle$  代表,基态  $5^2\text{S}_{1/2}$  有两个超精细态,自旋分别为  $F=2$  与  $F=3$ ,分别用  $|2\rangle$  与  $|3\rangle$  表示。光驻波频率  $\omega_0$  调在  $|2\rangle \rightarrow |e\rangle$  与  $|3\rangle \rightarrow |e\rangle$  跃迁之间,即  $|2\rangle$  与  $|e\rangle$  跃迁失谐参数为负,  $\Delta_{2e} < 0$ , 而  $|3\rangle$  与  $|e\rangle$  跃迁失谐参数为正,  $\Delta_{3e} > 0$ , 且  $\Delta_{3e} = -\Delta_{2e}$ , 设入射原子处于  $|2\rangle$  态,在它到达第一个分束器以前先经过微波场,其频率  $\omega_{\text{mw}}$  等于  $|2\rangle$  与  $|3\rangle$  的能量差(除以  $\hbar$ )。脉冲长短调节到使  $|2\rangle$  与  $|3\rangle$  混合为  $^{\text{①}}|3\rangle + |2\rangle$ 。当这束原子遇到第一个分束器时,透射束没有相移,而在布拉格反射束中,作用于  $|2\rangle$  的光移势为负,相当于在光密介质上的反射,将有相移  $\pi$ ; 作用于  $|3\rangle$  的光移势为正,没有相移。因此,透射束为  $|3\rangle + |2\rangle$ , 反射束为  $|3\rangle - |2\rangle$ 。在分束器之后两束分离。再经过一个频率和脉冲长短都与前一个相同的微波场,透射束变为  $|3\rangle$ , 而反射束变为  $|2\rangle$ 。这样,走“哪一条路径”的信息便被巧妙地储存在原子的内部状态中了。当这两束再经过第二个分束器到达探测器平面时,就看不到干涉条纹了(图 1.10)。这时在探测器平面上对  $|2\rangle$  与  $|3\rangle$  是一律探测而不加区别的,即实际上并没有去测量“哪一条路径”的信息。但只要这种信息有被获取的潜在可能性,干涉条纹就不再出现。当然,如果探测器区分  $|2\rangle$  与  $|3\rangle$ , 计数率曲线形状仍与图 1.10 所示的相同,只是大小减半而已。干涉消失的原因是内部自由度与原子质心运动的缠绕。通过第二个分束器后的波函数是(图 1.8 和图 1.9)

$$|\psi\rangle \propto -|\psi_D\rangle \otimes |2\rangle + |\psi_E\rangle \otimes |3\rangle + |\psi_F\rangle \otimes |2\rangle + |\psi_G\rangle \otimes |3\rangle$$

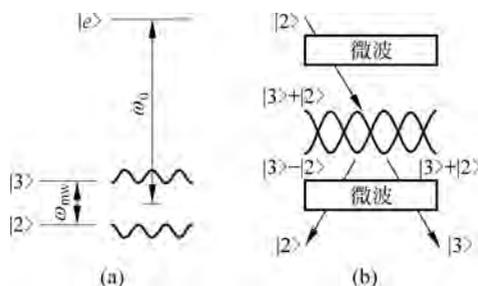


图 1.9 路径信息存储于原子内部状态

(a)  $^{85}\text{Rb}$  原子简化能级; (b) 用两个  $\pi/2$  脉冲微波改变原子内部状态

$|2\rangle$  在布拉格反射时相移  $\pi$ (相因子  $e^{i\pi} = -1$ ) 给出负号。与  $|\psi_D\rangle$  直积的  $|2\rangle$  反射一次给出负号,而与  $|\psi_F\rangle$  直积的  $|2\rangle$  因反射两次给出正号。在远场处左方包络线下(此处  $\psi_F, \psi_G$  为 0)的原子位置(坐标  $z$ )分布是

$$P_L(z) \propto |\psi_D(z)|^2 + |\psi_E(z)|^2 - \psi_{D^*}(z)\psi_E(z)\langle 2|3\rangle - \psi_{E^*}(z)\psi_D(z)\langle 3|2\rangle$$

上式右方第三、四项是干涉项,但由于  $|2\rangle$  与  $|3\rangle$  正交,它们都为 0 而使干涉条纹消失。有趣的是,在准备有关路径的信息时,微波场会给原子以干扰,造成原子动量的变化  $\Delta p_z$ , 但计算

<sup>①</sup> 略去归一化因子,本节以下推导中同此。关于两能级由共振电磁场所混合问题,请参阅本书 8.2 节。

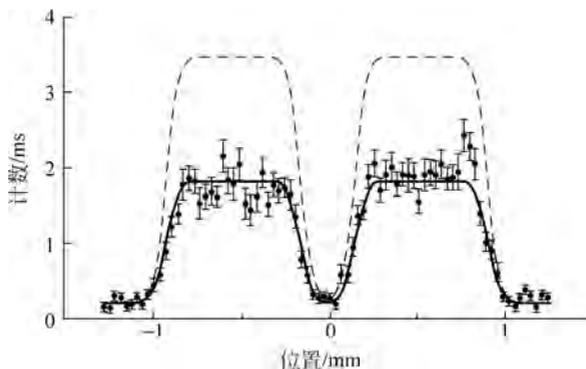


图 1.10 路径信息存储于原子内部状态后在包络线下干涉条纹消失

表明<sup>[6]</sup>,微波场在探测器平面上造成原子位置的移动是  $\Delta z = \pm 10\text{nm}$ 。和条纹位置图上的尺度毫米相比,这是观察不到的。干涉粒子与探测器的关联(缠绕)在任何“哪一条路径”的实验中都会出现。在费曼双缝衍射中用光显微镜观察粒子或爱因斯坦的悬挂反冲狭缝的例子中,这些缠绕本来都是存在的。但由于测量路径所带来的动量不确定性正好能说明干涉条纹的消失,教科书中便把它作为唯一的原因,而把态的缠绕推到后面去了。通过普里查德研究组的实验和上述分析,动量不确定性都不能说明条纹消失,就凸显了状态缠绕为其根本原因。

### 1.3 并协原理的量子光学验证

1.2 节提到,在爱因斯坦和费曼想象中的实验里,都是由于海森堡动量-位置不确定关系破坏了相干,从而使并协原理成立。M. O. Scully, B-G. Englert 和 H. Walther<sup>[9]</sup>则想出一个绕过这个不确定关系的办法来判断走“哪一条路径”。他们的想法基于量子光学微脉泽(micromaser)<sup>①</sup>技术的新进展。一个处于长寿命激发态的原子在通过高品质的微脉泽腔时,会发射光子而退激到更低的状态上。这种利用腔的条件大大提高发射概率的现象是“腔量子电动力学”<sup>②</sup>的研究内容。建议的实验装置如图 1.11 所示。用激光将 Rb 原子共振激发到长寿命里德伯(Rydberg)态  $63p_{3/2}$ 。如果不放置微脉泽腔而让原子通过双缝,则在双缝后面原子的波函数是

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\mathbf{r}) + \psi_2(\mathbf{r})] |a\rangle \quad (1.3.1)$$

此处  $\mathbf{r}$  是原子的质心坐标。 $|a\rangle$  代表原子的内部状态  $63p_{3/2}$ 。在屏幕上(坐标  $\mathbf{R}$ ) 的概率密度由  $|\psi|^2$  给出:

$$\begin{aligned} P(\mathbf{R}) = |\psi|^2 &= \frac{1}{2} [|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + (\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1)] \langle a | a \rangle \\ &= \frac{1}{2} [|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + (\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1)] \end{aligned} \quad (1.3.2)$$

方括号中的第三项表示干涉。微脉泽腔可以使位于  $63p_{3/2}$  态的原子发射微波光子(约 21GHz)

① 参阅本书 8.4 节。

② 参阅本书第 8 章。

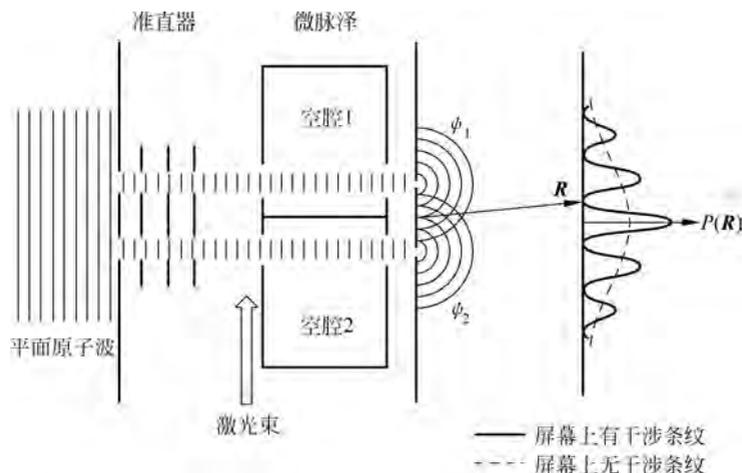


图 1.11 通过微脉泽腔的双缝干涉

而跃迁到  $61d_{5/2}$  (记为  $|b\rangle$ ) 或  $61d_{3/2}$  (记为  $|c\rangle$ )。设腔调谐到跃迁  $|a\rangle \rightarrow |b\rangle$ , 原子通过后发射光子, 可以从哪一个腔中出现光子判断原子的路径。发射光子后原子的内部状态发生变化, 但质心坐标的空间波函数不变<sup>①</sup>。由于发射光子, 原子与微脉泽腔的状态出现了关联。原子-腔体系的状态是

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\mathbf{r}) |1_1 0_2\rangle + \psi_2(\mathbf{r}) |0_1 1_2\rangle] |b\rangle \quad (1.3.3)$$

此处  $|1_1 0_2\rangle$  代表腔 1 有 1 个光子, 腔 2 没有,  $|0_1 1_2\rangle$  可以此类推。状态 (1.3.3) 与式 (1.3.1) 的根本不同之处在于式 (1.3.3) 不再能像式 (1.3.1) 那样写成原子波函数与光子自由度的乘积<sup>②</sup>, 而是薛定谔纠缠态。计算屏幕上的概率密度, 得

$$\begin{aligned} P(\mathbf{R}) &= \frac{1}{2} [|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2 + \psi_1^* \psi_2 \langle 1_1 0_2 | 0_1 1_2 \rangle + \psi_2^* \psi_1 \langle 0_1 1_2 | 1_1 0_2 \rangle] \langle b | b \rangle \\ &= \frac{1}{2} [|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2] \end{aligned} \quad (1.3.4)$$

这是因为  $|1_1 0_2\rangle$  与  $|0_1 1_2\rangle$  正交。可见, 只要存在判断原子走“哪一条路径”的可能, 干涉便消失了, 根本用不着测量, 这里海森堡不确定关系并没有发挥作用。干涉消失是原子质心波函数和光子自由度的关联所致。

从以上的讨论和 1.2 节的讨论可以看到并协原理得以实现, 在不同的情况下会有不同的机制。1.2 节的讨论涉及相干的部分恢复问题, 在本节的讨论中相干的消失是由于原子与光子自由度产生了关联。那么如果能抹去这个关联, 相干能否恢复? 这就是量子涂消器 (the quantum eraser) 的思想。下文讨论的是一个原理性的涂消器, 其实现是不容易的。考虑图 1.12 中的原子-微脉泽腔系统。两个腔用探测器-光闸体系隔开, 探测器的初态是它的基态  $|g\rangle$ 。如果它吸收了一个光子, 就跃迁到激发态  $|e\rangle$ 。当原子通过了双缝之后, 打开光

① 不计发射微波光子导致的原子动量变化。

② 例如式 (1.3.1) 便是  $\left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\mathbf{r}) + \psi_2(\mathbf{r})] |a\rangle \right\} |0_1 0_2\rangle$ 。

闸，“符合条件”的光子遇到探测器就会被吸收，两个腔都处于基态。此时“哪一个路径”的信息就被抹去。重要的一点是，此时原子已通过双缝，打开光闸和光子被吸收是不可能物理上影响原子的<sup>①</sup>。难道相干能恢复吗？答案是肯定的，但需要探测器有一种特殊性质。光闸打开之前，原子-腔-探测器体系的波函数是

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\mathbf{r}) |1_1 0_2\rangle + \psi_2(\mathbf{r}) |0_1 1_2\rangle] |b\rangle |g\rangle \quad (1.3.5)$$

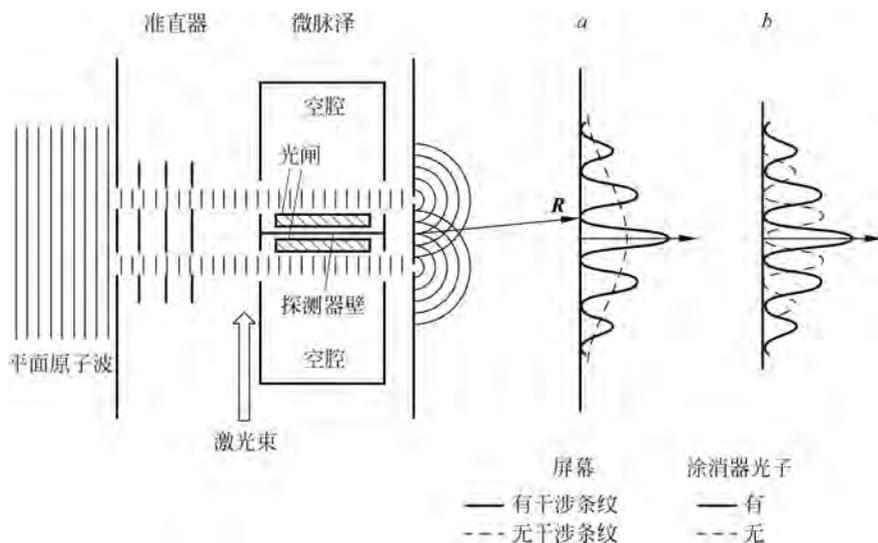


图 1.12 量子涂消器

定义原子质心波函数的对称态  $\psi_+$  和反对称态  $\psi_-$ ：

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\mathbf{r}) \pm \psi_2(\mathbf{r})] \quad (1.3.6)$$

以及腔辐射场的对称态  $|+\rangle$  和反对称态  $|-\rangle$

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|1_1 0_2\rangle \pm |0_1 1_2\rangle] \quad (1.3.7)$$

波函数式(1.3.5)可以改写为

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_+(\mathbf{r}) |+\rangle + \psi_-(\mathbf{r}) |-\rangle] |b\rangle |g\rangle \quad (1.3.8)$$

如果探测器只对光子  $|+\rangle$  态灵敏而对  $|-\rangle$  态不灵敏<sup>②</sup>，则在光闸打开之后总体系波函数就变为

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_+(\mathbf{r}) |0_1 0_2\rangle |e\rangle + \psi_-(\mathbf{r}) |-\rangle |g\rangle] |b\rangle \quad (1.3.9)$$

第一项来自式(1.3.8)中的光子  $|+\rangle$  被吸收，变为无光子态，而探测器被激发到  $|e\rangle$  态，第二

<sup>①</sup> 这种措施称为“推迟选择”(delayed choice)，参阅 1.9 节。

<sup>②</sup> 这就是上文提到的“特殊性质”。探测器的作用是吸收光子从而使两个腔均处于基态而抹去了“哪一条路径”的信息，而不是提供原子从哪一个腔通过的信息。

项没有变化。如果只求屏幕上的概率密度,则有

$$P(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} [|\psi_+(\mathbf{R})|^2 + |\psi_-(\mathbf{R})|^2] = \frac{1}{2} [|\psi_1(\mathbf{R})|^2 + |\psi_2(\mathbf{R})|^2] \quad (1.3.10)$$

没有干涉条纹。但如果求探测器位于激发态时屏幕上的概率密度,则有

$$P_e(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} |\psi_+(\mathbf{R})|^2 = \frac{1}{4} \{|\psi_1(\mathbf{R})|^2 + |\psi_2(\mathbf{R})|^2 + \text{Re}[\psi_1^*(\mathbf{R})\psi_2(\mathbf{R})]\} \quad (1.3.11)$$

干涉条纹重现。如果只求探测器处于基态时屏幕上的概率密度:

$$P_g(\mathbf{R}) = \frac{1}{4} \{|\psi_1(\mathbf{R})|^2 + |\psi_2(\mathbf{R})|^2 - \text{Re}[\psi_1^*(\mathbf{R})\psi_2(\mathbf{R})]\} \quad (1.3.12)$$

干涉也存在。由于干涉项与式(1.3.11)相比符号相反,可以称它为“反干涉条纹”,以虚线示于图 1.9(b)。如果不理会探测器的状态,把所有到过屏幕的原子都记录下来,就有

$$P(\mathbf{R}) = P_e(\mathbf{R}) + P_g(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} (|\psi_1(\mathbf{R})|^2 + |\psi_2(\mathbf{R})|^2)$$

和式(1.3.10)完全一样。探测器提供了量子涂消的机会。如果在确切涂消的情况下(探测器处于激发态)再记录屏幕上的原子,则干涉条纹完全恢复,当然记录的粒子总数会减半。

以上分析在原理上确立了量子涂消的可能性。相干的消失在于形成缠绕态。如果能设法取消缠绕(取联合概率,丢开式(1.3.9)方括号中的第二项),则相干恢复。重要的一点是,探测器的运作是在原子通过双缝以后,因此原子显示波动性或粒子性并非探测器“打招呼”的结果,这是微观系统本来的性质,这一点在讨论贝尔定理时会再次遇到。

以上描述的量子涂消器原理很理想,但真正实现起来是困难的。首先实现量子涂消的是乔瑞宇的研究组,他们使用了双光子干涉。我们将在 1.6 节讨论这个问题。

本节讨论的问题在 1993 年的一次会议上曾有过争论<sup>[10]</sup>。

史砚华等人在 2000 年展现了“推迟选择”的量子涂消器,我们在 1.6 节中再讨论这个装置。

## 1.4 单光子干涉实验

狄拉克在他的经典著作《量子力学原理》的第 1 章中讨论了量子力学对光子干涉的描述:“每个光子只和它自己干涉”,多年来有许多实验企图直接演示这个结论。他们用不同的干涉仪、减弱的光源,还有“反聚束装置”,以“保证”在干涉仪中同一时刻只能有一个光子。在实验中观察到干涉条纹,因此做出证实狄拉克论断的结论。20 世纪 80 年代对光的统计性质中的非经典效应的研究发展,对这个看来无懈可击的结论提出了挑战。

A. Aspect, P. Grangier 和 G. Roger<sup>[11]</sup>用分束器做反符合实验,原理示于图 1.13。光源 S 发出光脉冲,射在分束器 BS (beam splitter) 上。发出脉冲的同时触发器对计数装置开一个时间间隔为  $\omega$  的窗口。光电倍增管  $PM_r$  和  $PM_t$  记录在透射(t)道和反射(r)道中的计数率  $N_t$  和  $N_r$ 。符合计数率为  $N_c$ 。令  $N_w$  为脉冲率,则反射、透射和符合计数概率分别为

$$P_r = \frac{N_r}{N_w}, \quad P_t = \frac{N_t}{N_w}, \quad P_c = \frac{N_c}{N_w} \quad (1.4.1)$$

先从光的经典波动描述出发,设在一个时间窗口内的平均光强为  $i$ , 在分束器处光分为两束。令  $\alpha_t$  代表分束器透射效率和透射道探测器效率的乘积,则有

$$P_t = \alpha_t \omega i$$

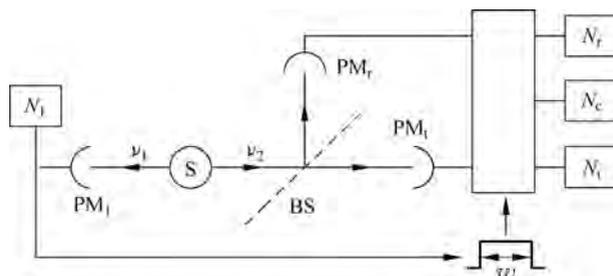


图 1.13 检验光源单光子发射的装置

类似地,有

$$P_r = \alpha_r \tau \omega i,$$

$$P_c = \alpha_r \alpha_t \tau \omega^2 i^2$$

对许多脉冲(窗口)做系综平均,有

$$P_t = \alpha_t \tau \langle i \rangle,$$

$$P_r = \alpha_r \tau \langle i \rangle,$$

$$P_c = \alpha_r \alpha_t \tau \omega^2 \langle i^2 \rangle$$

据柯西-施瓦茨(Cauchy-Schwartz)不等式 $\langle i^2 \rangle \geq \langle i \rangle^2$ ,有

$$P_c \geq P_t P_r \quad (1.4.2)$$

定义

$$\alpha = \frac{N_c / N_w}{\frac{N_t}{N_w} \frac{N_r}{N_w}} \quad (1.4.3)$$

则有

$$\alpha \geq 1 \quad (1.4.4)$$

如果光源发出的是光子,则这个装置应给出 $P_c = 0$ ,因为光子只能进入一个道,反射道或透射道,亦即 $\alpha = 0$ 。

Aspect 的研究组用光二极管进行测量。减弱的光源相当于 1 个计数/1 000 脉冲。探测器的效率约为 10%,相当于一个脉冲只有 0.01 个光子。测量结果 $\alpha \approx 1$ ,说明一般光源不论多么弱,只呈现经典性质。在经典光源中有宏观数量的原子处于激发态,可能有若干原子同时发射光子。自发发射是随机的。经典光源的光子发射统计性质是泊松分布(Poisson distribution)。不论光源如何弱(发射两个光子的平均间隔时间如何长),一个光子从光源发出,立即有第二个光子发出的概率是有限的,即不为 0。激光也属于经典光源,用经典光源所进行的干涉实验不能认为是对光子只能和自己干涉的确切证明。这个证明必须用非经典光源,即 $\alpha$ 要比 1 小很多(由于窗口 $\omega$ 有限,偶然符合使 $\alpha$ 不能严格为 0)。Aspect 的研究组制成了“单原子发射光源”。用激光双光子共振激发 Ca 原子束到 $4p^2 \ ^1S_0$ 态,它级联发射两个光子(相隔 4.7ns),其能级和跃迁示于图 1.14。第一个光子可用于触发光子探测器,第二个光子进入分束器。在实验条

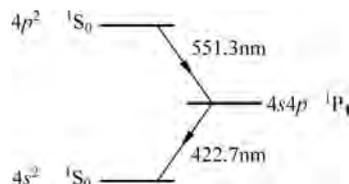


图 1.14 Ca 原子辐射级联,用于单原子发射光源

件下有另一个 Ca 原子同时发射一个光子并也进入分束器的可能性很小。在触发率为  $8\ 800\text{s}^{-1}$  时计数 5h,得出的结果是  $\alpha=0.18\pm 0.06$ ,与最小经典值  $\alpha=1$  比有 13 个标准偏差。

用单原子发射光源进行了干涉实验,图 1.15 是干涉仪示意图。 $MZ_1$  和  $MZ_2$  是光电倍增管,虚线代表镀膜的分束器  $BS_1$  和  $BS_2$ 。通过移动反射镜可以调节两臂的光程差。光波在分束器上反射的一束和透射的一束相比有相角差  $\pi/2$ 。因此如果两臂长度相等,进入  $MZ_1$  的两束相差为 0,而进入  $MZ_2$  的两束相差为  $\pi$ 。因此  $MZ_2$  中不应有计数。当两臂长度差连续变化时,两个探测器中的计数周期变化且正好反相,结果示于图 1.16(计数时间为 15s/道)。光程差用通道数表示,一道相当于  $\lambda/50$ 。这个实验相当于光源参数  $\alpha=0.18$ 。结果表明,基本上同一时刻只有一个光子处于干涉装置之内,它实现了自己和自己的干涉。

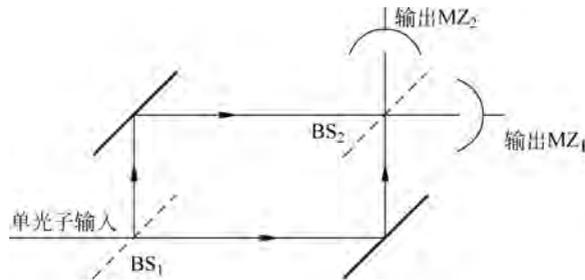


图 1.15 Mach-Zehnder 干涉仪示意图

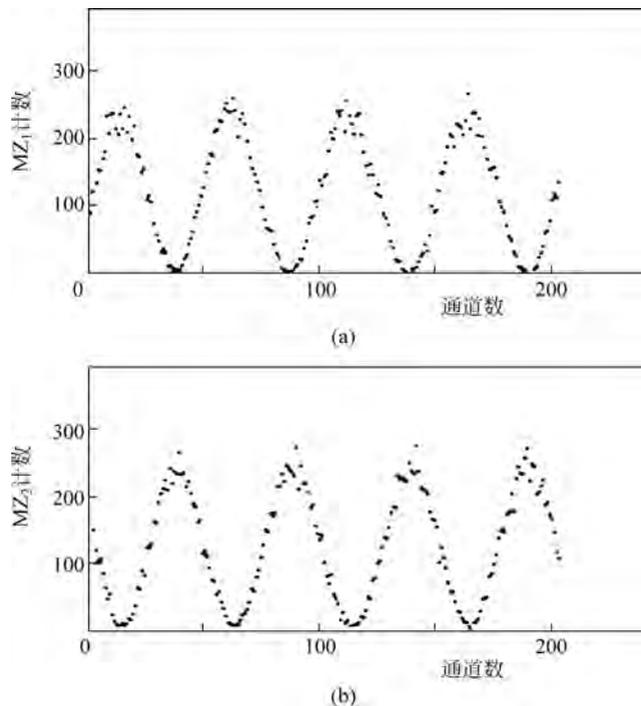


图 1.16  $MZ_1$  和  $MZ_2$  的输出计数,作为光程差的函数

### 独立光子束之间的干涉

一束光在分束器上分为两个分量,它们在此后重合并发生干涉。狄拉克<sup>[12]</sup>强调,每个光子只和它自己干涉,两个不同光子间的干涉永远不会发生。入射束中的每一个光子都分为两个分量。每个光子最终都和它自己干涉,即它的两个分量间发生干涉。狄拉克的判断没有预言、也没有否定两个独立光子是否干涉,或两个独立光束相重叠时是否干涉。

A. T. Forrester, R. A. Gudmundsen 和 P. Q. Johnson<sup>[13]</sup>进行了一个实验,他们观测到两个频率稍有不同的非相干光阵列的拍频现象。他们用的是<sup>202</sup>Hg 光源的 546.1nm 谱线的两个塞曼(Zeeman)分量。这两个分量显然是从同一光源的不同原子发射出来的。光聚焦在光阴极上,被击出的电子引入微波腔,在腔中测出电子发射的周期性。由于不同谱线的非相干性和光阴极上不同地点拍频间的非相干性,测量的信号与噪声比极低,仅为  $3 \times 10^{-5}$ 。在保持总强度为常数的情况下采用拍频的光调制,信号与噪声比提高到 2。拍频现象可以理解干涉,因为这个现象体现了电磁场叠加的效应:是场强叠加而不是强度叠加。R. Hanbury Brown 和 R. Q. Twiss<sup>[14]</sup>研究了星体(热光源)的强度涨落。他们测量了两个探测器光电流的关联函数:

$$G^{(2)}(\mathbf{r}_1, t; \mathbf{r}_2, t) = \langle I(\mathbf{r}_1, t)I(\mathbf{r}_2, t) \rangle \quad (1.4.5)$$

此处 $\langle \rangle$ 是作为两个探测器间距离 $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ 函数的系综平均。他们得到了有趣的结果: $G^{(2)}$ 在 $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = 0$ 处呈现极大值,并且在 $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ 增大时逐渐减小到一个常数值。在 $G^{(2)}$ 减小到常数值时相应的 $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ 就是星体光到达地球时的横向相干长度。这是两个非相干光源间的干涉现象,作者用来估计星体的直径。从量子力学的观点看,这个现象是一种选择(光子 1 进入探测器 I,光子 2 进入探测器 II)与另一种选择(将两个光子交换)间的干涉。

许多研究者用激光束进行研究,发现在光束经过高度减弱之后仍能观察到干涉现象。弗莱格(R. L. Pfleeger)和曼德尔<sup>[15]</sup>采用了两个独立操控的单模激光。将光束减弱到一个光子被记录之后下一个光子才被光源发射出来的程度。这时仍能观察到干涉现象。由于每一轮实验记录的光子平均数目只有约 10 个,采用了光子关联技术得以展示干涉现象。作者测得了关联系数。对上述这些实验,经典电磁场理论得出的结果与实验完全符合,甚至在光束高度减弱时也是如此。理由是,对格劳伯(Glauber)态 $|\alpha\rangle \equiv |\alpha|e^{i\theta}\rangle$ ,光束减弱可以使振幅减小,但相位不受影响,干涉的相位关系维持不变。保罗(H. Paul)<sup>[16]</sup>计算了强度关联函数式(1.4.5)。他考虑两个位于 $\mathbf{r}_I$ 与 $\mathbf{r}_{II}$ 并发出光子 $\mathbf{k}_1$ 与 $\mathbf{k}_2$ 的赫兹偶极振子。光子在 $\mathbf{r}_1$ 与 $\mathbf{r}_2$ 处进入探测器,得到的结果是

$$G^{(2)}(\mathbf{r}_1, t; \mathbf{r}_2, t) = 4f^4 \bar{a}^4 \left\{ 1 + \frac{1}{2} \cos [(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)(\mathbf{r}_{II} - \mathbf{r}_I)] \right\} \quad (1.4.6)$$

此处 $f$ 是与 $e^{-i\omega t}$ 因子相配的电场 $\mathbf{E}^{(+)}$ 的振幅, $\bar{a}(t) = e^{-2\Gamma t/2}$ 是偶极振子算符的阻尼因子。 $G^{(2)}(\mathbf{r}_1, t; \mathbf{r}_2, t)$ 对 $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ 的依赖通过 $\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1$ 实现,假设两个偶极子间的距离比源——探测器距离小得多。

当我们研究两个受激原子发射的光子干涉时,情况会发生变化。这时电磁场不再能用格劳伯态的密度矩阵描述了。电磁场应是量子化的,光子是电磁场的量子。令 $\mathbf{E}^{(\pm)}(\mathbf{r}, t)$ 代表在 $(\mathbf{r}, t)$ 电磁场的正、负频率部分,分别与湮灭算符和产生算符相配。干涉由以下强度关联函数描述:

$$G_{\text{qu}}^{(2)}(\mathbf{r}_1, t; \mathbf{r}_2, t) = \sum_{i,j} \langle E_i^{(-)}(\mathbf{r}_1, t) E_j^{(-)}(\mathbf{r}_2, t) E_j^{(+)}(\mathbf{r}_2, t) E_i^{(+)}(\mathbf{r}_1, t) \rangle \quad (1.4.7)$$

求和  $i, j = 1, 2, 3$ , 得到

$$G_{\text{qu}}^{(2)}(\mathbf{r}_1, t; \mathbf{r}_2, t) = 2f^4 \tilde{a}^4 \{1 + \cos[(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)(\mathbf{r}_{\parallel} - \mathbf{r}_1)]\} \quad (1.4.8)$$

将式(1.4.8)与式(1.4.6)比较,可以看出经典理论和量子理论有明显差别。经典  $G^{(2)}$  的可能极小值是它的平均值的 1/2, 而量子理论的  $G_{\text{qu}}^{(2)}$  的极小值是 0。量子理论给出的关联要强得多。如保罗所指出的<sup>[16]</sup>, 在格劳伯相干态中, 经典理论与量子理论的等价性是光子数的不确定导致的, 而且没有上限。但当我们处理的是两个受激原子的场时, 光子数是有限的。在此情况下经典理论与量子理论不同。

最后要讨论这些实验是否和狄拉克的断言矛盾。曼德尔<sup>[17]</sup>指出它们不矛盾。实际上确实有两个光子被记录下来, 它们的关联和相对相位有关, 即观测到干涉现象。关键之处在于, 是否可以将每个光子和两个原子分别联系起来。如果答案是肯定的, 干涉就是在两个独立光子之间进行的, 但实际情况恰恰相反。由光电测量记录下的光子排斥了确定光子动量的可能性, 也就排斥了将光子归于两个原子(或两束光)之一的可能性。弗莱格和曼德尔<sup>[15]</sup>用不确定性关系演示了这个结论。这样就和常规的干涉学一样, 每个光子都是部分地属于一束, 又部分地属于另一束, 而光子对自己和自己干涉。每个记录的光子是由两束建立的量子化电磁场中的一个量子, 它不属于哪个特定的束(原子), 或者说, 它属于两个束(原子)。两个原子间的干涉现象将在 1.5 节进一步讨论。保罗在文献<sup>[16]</sup>中的提法, “狄拉克关于两个不同光子之间的干涉永远不会发生的论述是不正确的”是不合适的。

## 1.5 多粒子干涉学

从 20 世纪 80 年代开始, 一些实验室利用激光在非线性晶体中的“下转换”(down conversion)产生一对光子。这种过程可以用来构成“二光子纠缠态”, 从而制成二粒子干涉仪。首先提出这个想法的是霍恩(M. A. Horne)和塞林格<sup>[18-19]</sup>, 不少研究组都建立了设备, 用此来集中研究量子力学基本问题的先导是曼德尔领导的研究组。这个研究方向呈现了光的新的非经典性质, 并对贝尔不等式的破坏给予了更精确的实验验证。新的研究结果正不断涌现。

### 1.5.1 二粒子双缝干涉学

如图 1.17 所示, 在  $O$  处有粒子源, 长度为  $d$  (图中未标出)。设有一位于  $S$  处的粒子衰变产生两个粒子。因为衰变粒子是静止的, 所以两个衰变产物的动量基本上是相反的。  $A, B$  与  $A', B'$  是两对小孔。一对衰变产物可以通过  $A$  和  $A'$  落到探测屏幕上的  $P$  和  $P'$  点, 但它们也可以通过  $B$  和  $B'$  落到这两点。这一对粒子的状态以

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|A\rangle_1 |A'\rangle_2 + |B\rangle_1 |B'\rangle_2) \quad (1.5.1)$$

表示。式中  $|A\rangle$  代表粒子动量指向  $A$  点的状态, 其余定义也与此类似。这一对粒子最终到达  $P$  和  $P'$ , 但它们各有两个选择, 一个粒子可以选  $SAP$  或  $SBP$ , 另一个相应地选  $SA'P'$  或  $SB'P'$ 。令衰变粒子距  $O$  为  $x$ , 记录点  $P$  距  $Q$  为  $y$ ,  $P'$  距  $Q'$  为  $y'$ , 并令  $L$  代表  $OAQ$  的距

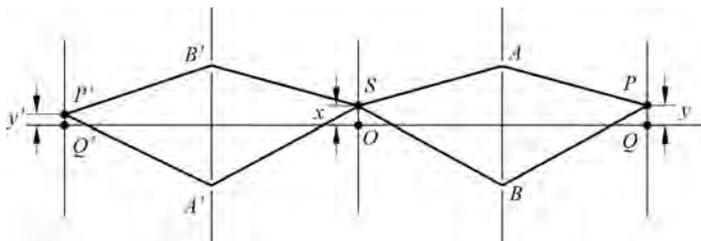


图 1.17 二粒子干涉示意图

离,  $\theta$  为  $\angle AOQ$ , 则有

$$SAP = L - x\theta - y\theta,$$

$$SBP = L + x\theta + y\theta$$

在  $P$  处的概率幅为

$$\begin{aligned} \psi(P) &\propto e^{ikL} (e^{-ik(x+y)\theta} + e^{ik(x+y)\theta}) \\ &\propto \cos \frac{2\pi}{\lambda} (x+y)\theta \end{aligned} \quad (1.5.2)$$

此处波矢  $k = 2\pi/\lambda$ ,  $\lambda$  为德布罗意波长。如果要测量源上各粒子衰变产物在  $P$  与  $P'$  处的符合计数, 则其概率幅为

$$\psi(y, y') \propto \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} dx \cos \frac{2\pi}{\lambda} (x+y)\theta \cos \frac{2\pi}{\lambda} (x+y')\theta \quad (1.5.3)$$

将被积分函数进行变换:

$$\cos \frac{2\pi}{\lambda} (x+y)\theta \cos \frac{2\pi}{\lambda} (x+y')\theta = \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi}{\lambda} (y-y')\theta + \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi}{\lambda} (2x+y+y')\theta$$

因此有

$$\psi(y, y') \propto \frac{1}{2} \cos \frac{2\pi}{\lambda} (y-y')\theta + \frac{1}{2d} \int_{-d/2}^{d/2} dx \cos \frac{2\pi\theta}{\lambda} (2x+y+y') \quad (1.5.4)$$

讨论两种极限情况:

(1)  $d \gg \frac{\lambda}{\theta}$ , 此时式(1.5.4)中的第二项很小, 可以略去。第一项正是“条件性条纹”, 即如果确定  $P'$  点并令  $P$  变化, 两处的符合计数将周期性变化; 如果确定  $P$  点, 令  $P'$  变化, 情况也一样。这称为“双粒子干涉”。正是由于一对粒子都有相对应的两种选择, 这两条路径就会产生干涉。

(2)  $d \ll \frac{\lambda}{\theta}$ , 这样  $x$  在式(1.5.3)的被积分函数中就可以忽略, 得到

$$\psi(y, y') \propto \cos \frac{2\pi}{\lambda} y\theta \cos \frac{2\pi}{\lambda} y'\theta \quad (1.5.5)$$

这是两个独立的单粒子干涉的乘积, 两个粒子独立地自己和自己干涉。从动量空间分析, 很容易理解上述两种情况。

(1) 根据不确定性原理, 粒子横向动量的不确定性为  $\delta k_{\perp} \propto \frac{1}{d}$ 。如果  $d \gg \lambda/\theta$ , 则有

$$\delta k_{\perp} \ll \frac{\theta}{\lambda}, \quad \frac{\delta k_{\perp}}{k_{\perp}} \ll \frac{\theta}{2\pi} \quad (1.5.6)$$

每个粒子的横向坐标不确定性太小, 不足以包括  $A, B$  (或  $A', B'$ ) 两个孔, 因此它们都无法和自己干涉, 没有单粒子条纹。

(2) 如果  $d \ll \frac{\lambda}{\theta}$ , 则有  $\frac{\delta k_{\perp}}{k_{\perp}} \gg \frac{\theta}{2\pi}$ , 每个粒子都可以“照亮”自己一侧的两个孔, 因此就有单粒子条纹。但由于横向动量不确定性太大, 无法保证一个粒子通过  $A$  就有另一个粒子通过  $A'$  的对应 ( $B, B'$  也是如此)。因此就破坏了二粒子缠绕态 (式 (1.5.1)), 不能产生二粒子条件性条纹。

从上述分析可以看到, 二粒子干涉与单粒子干涉存在一个重大不同。以光子而论, 单粒子干涉可以用电磁波动理论描述, 但双光子干涉是从缠绕态开始的, 这是基于量子力学的原理, 因此是非经典性的, 属于非经典光学现象。

### 1.5.2 下转换光子干涉实验

激光通过非线性晶体的下转换使原有光子  $k$  转变为两个相互关联光子  $k_A$  和  $k_C$ , 并有  $k = k_A + k_C$ 。实验<sup>[20]</sup>和理论<sup>[21]</sup>显示, 在  $|k_A| \neq |k_C|$  的情况下, 可以获得相对于入射光子方向不对称的下转换光子 (图 1.18)。如图 1.19 所示, 在下转换晶体  $S$  右方的光阑上取 4 个针孔, 使从晶体中射出的关联光子对可以有两种选择:  $A$  和  $C$  方向, 或  $D$  和  $B$  方向, 并且有

$$|k_A| = |k_D|, \quad |k_B| = |k_C| \quad (1.5.7)$$

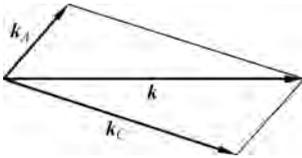


图 1.18 不对称下转换光子对

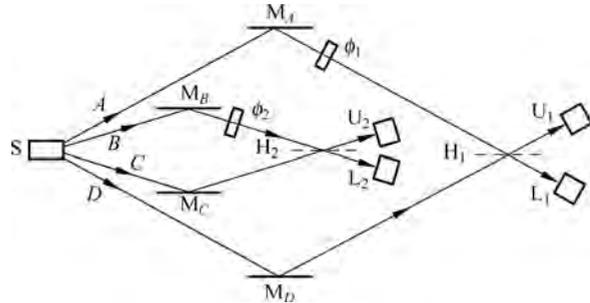


图 1.19 二光子干涉仪示意图

这样就获得一对关联光子的缠绕态:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |k_A\rangle_1 |k_C\rangle_2 + |k_D\rangle_1 |k_B\rangle_2 ] \quad (1.5.8)$$

在干涉仪 (图 1.19) 装置中, 光子沿  $A$  经反射镜  $M_A$  到移相器  $\phi_1$ , 再到分束器  $H_1$ , 之后或进入探测器  $U_1$ , 或进入  $L_1$ 。相应地, 另一个光子沿  $C$  经反射镜  $M_C$  到达分束器  $H_2$ , 后之或进入探测器  $U_2$ , 或进入  $L_2$ 。以上是这对光子的第一种选择。它们的另一种选择是第一个光子沿  $D$  经  $M_D, H_1$  进入  $U_1$  或  $L_1$ , 第二个光子沿  $B$  经  $M_B, \phi_2, H_2$  进入  $U_2$  或  $L_2$ 。探测器  $U_1$  和  $L_1$  接受的是第一个光子两条可能选择的路径  $A$  和  $D$  复合后的结果,  $U_2$  和  $L_2$  则是第二个光子两条可能选择的路径  $B$  和  $C$  复合后的结果。需测量的是二光子的符合计数率, 它作为相移  $\phi_1$  和  $\phi_2$  的函数, 然后和量子力学理论计算进行比较。

设探测器的量子效率为  $\eta$ , 则探测器  $U_1$  和  $U_2$  的符合计数率为  $\eta^2 |A(U_1 U_2 | \phi_1 \phi_2)|^2$ ,

此处  $A(U_1U_2 | \phi_1\phi_2)$  是作为  $\phi_1$  和  $\phi_2$  函数的  $U_1U_2$  符合概率幅,它是和两对相关路径 ( $AC$  与  $DB$ ) 的概率幅的叠加:

$$A(U_1U_2 | \phi_1\phi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left( \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi_1} \right) \frac{1}{\sqrt{2}} + e^{i\theta} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \left( \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi_2} \right) \right] \quad (1.5.9)$$

此处  $e^{i\phi_1}$  与  $e^{i\phi_2}$  是在沿  $A$  与  $B$  路径通过相移器获得的相因子,  $\frac{1}{\sqrt{2}}$  与  $\frac{1}{\sqrt{2}}i$  分别对应应在分束器处的透射与反射。式(1.5.9)方括号中的每项都有两个因子分别对应相互关联的第一个与第二个光子的路径。 $e^{i\theta}$  与反射镜和分束器的安排有关,与  $\phi_1$  和  $\phi_2$  无关。类似地可以得到

$$A(U_1L_2 | \phi_1\phi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \left( \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi_1} \right) \left( \frac{1}{\sqrt{2}}i \right) + e^{i\theta} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\phi_2} \right) \left( \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \right]$$

以及  $A(L_1U_2 | \phi_1\phi_2)$ ,  $A(L_1L_2 | \phi_1\phi_2)$ 。两个探测器的符合计数率分别是  $\eta^2$  乘以符合概率幅的模平方:

$$P(U_1U_2 | \phi_1\phi_2) = P(L_1L_2 | \phi_1\phi_2) = \eta^2 \left[ \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \cos(\phi_2 - \phi_1 + \theta) \right] \quad (1.5.10)$$

$$P(U_1L_2 | \phi_1\phi_2) = P(L_1U_2 | \phi_1\phi_2) = \eta^2 \left[ \frac{1}{4} - \frac{1}{4} \cos(\phi_2 - \phi_1 + \theta) \right] \quad (1.5.11)$$

符合计数率显示出二粒子干涉。如果只记录一个探测器(例如  $U_1$ )的计数率,就有

$$P(U_1 | \phi_1\phi_2) = P(U_1U_2 | \phi_1\phi_2) + P(U_1L_2 | \phi_1\phi_2) = \frac{\eta^2}{2} \quad (1.5.12)$$

同样有

$$P(U_2 | \phi_1\phi_2) = P(L_1 | \phi_1\phi_2) = P(L_2 | \phi_1\phi_2) = \frac{\eta^2}{2} \quad (1.5.13)$$

一对关联光子的干涉现象把狄拉克的名言做了补充:“一对关联光子只和自己这一对干涉。”

文献[18]在此基础上讨论了以上实验安排的变种,包括许多研究组的双粒子干涉仪。

这和狄拉克的名言“两个不同光子之间的干涉永远不会发生”是否矛盾?回答是不矛盾。两个下转换光子处于缠绕态。这对光子的路径有两种缠绕的选择: $A$ 与 $C$ ,或 $D$ 与 $B$ 。干涉是在这两种选择间发生,而不是在两个光子间发生。实际上这两个光子根本不会相逢:一个进入探测器  $U_1$  或  $L_1$ ,另一个进入  $U_2$  或  $L_2$ 。这种情况在曼德尔等人<sup>[22]</sup>的另一个实验中可以看得更清楚。一对下转换光子在分束器上混合,每个光子都可以进入探测器  $A$  或探测器  $B$ 。两个探测器中任何一个的计数都不呈现干涉(因此两个光子间没有干涉),而两个探测器的符合计数则可以显示干涉。很明显,在分束器上产生的每个光子的两个分量间发生了干涉。勒格罗(Legero)等人<sup>[23]</sup>进行的两个单光子量子拍频实验是另一个有趣的例子。两个独立的光子长脉冲到达分束器。一般来说,两个脉冲到达的时间有一个间隔,当然间隔也可以是零。每个脉冲都会进入探测器  $A$  或探测器  $B$ 。一个探测器首先记录了光子,这个测量将原始独立的两个光子缠绕起来。两个探测器的符合测量缠绕光子对的相干。每个光子都可以进入  $A$  或  $B$ ,但  $A$  或  $B$  的单独计数不呈现两个光子间的干涉,只有两个探测器的符合计数显示每个光子的两个模式(分量)之间的干涉。

## 1.5.3 发射时间的干涉

曼德尔<sup>[24]</sup>曾经指出,当两个独立的且在空间上分开的单原子光源使两个探测器产生符合计数,且记录的两个光子中的其中一个一定来自一个光源,而另一个来自另一个光源时,只要没有关于光子究竟来自哪一个光源的信息,就会发生干涉。J. Franson<sup>[25]</sup>提出另一个想法:只要无法判断光子是在什么时间发出的,就存在二光子干涉。乔瑞宇在 Franson 想法的基础上建立了高可见度干涉装置<sup>[26]</sup>①。图 1.20(a)为实验装置示意图,其中  $M_1, M_2$  是反射镜,  $B_1, B_2, B_1, B_2$  是分束器,  $F_1, F_2$  是滤光片,  $D_1, D_2$  是探测器。图 1.20(b)是装置的简化图,图中一对下转换光子同时到达探测器  $D_1$  和  $D_2$ 。在途中它们都有选择长途径和短途径的可能。长短途径所需的时间差在实验中是 4ns,而探测器的“同时”,实际是在窗口 1ns 内。由于两个光子在下转换中是同时产生的,所以,它们或是都选择了长途径,或是都选择了短途径。但装置中没有判断发射时间的可能,因此只能用线性组合表示这个缠绕态:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|s\rangle_1 |s\rangle_2 + |l\rangle_1 |l\rangle_2) \quad (1.5.14)$$

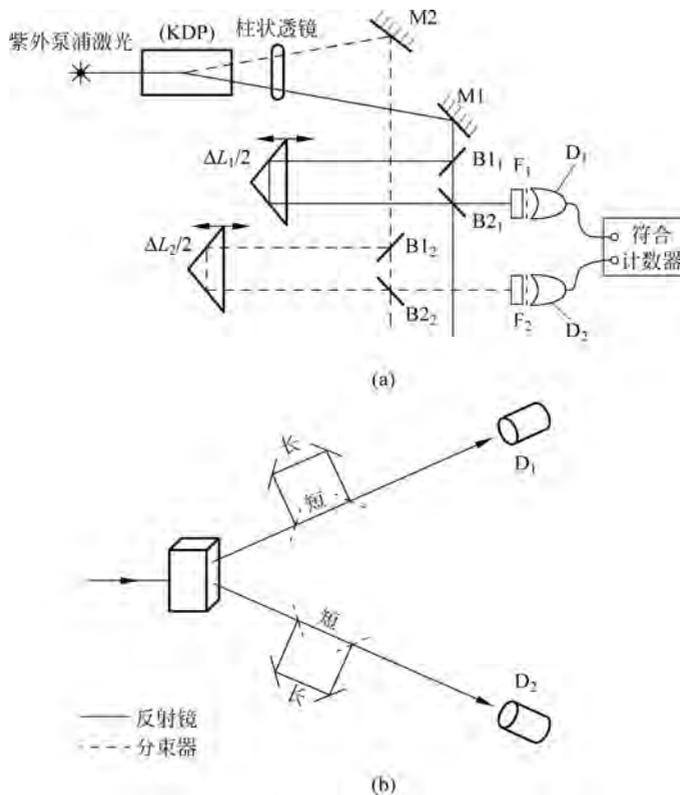


图 1.20 发射时间干涉仪装置

(a) 示意图; (b) 简化图

式中,  $s$  代表短途径,  $l$  代表长途径。变更一个光子的长途径长度(移动图 1.20(a)中的棱镜)就能改变  $|\psi\rangle$  中两项的相对相角。令  $\Delta L_i = L_i - S_i$ , 此处  $i = 1, 2$ , 而  $L_i$  与  $S_i$  分别代表

① 这个装置还对贝尔不等式被破坏给予了精确的演示,见 1.8 节。

光子  $i$  的长途径与短途径长度。  $|\psi\rangle$  中两项的相对相角为

$$\Delta\phi = \omega_1 \frac{\Delta L_1}{c} + \omega_2 \frac{\Delta L_2}{c} = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2c} (\Delta L_1 + \Delta L_2) + \frac{\omega_1 - \omega_2}{2} (\Delta L_1 - \Delta L_2)$$

此处  $\omega_1$  与  $\omega_2$  是两个光子的角频率。在实验中选择  $\omega_1 \approx \omega_2$ , 即  $\omega_1 - \omega_2 \approx 0$ 。引入  $\omega_p = \omega_1 + \omega_2$ ,  $\omega_p$  是产生下转换光子的角频率。因此

$$\Delta\phi = \frac{\omega_p}{2c} (\Delta L_1 + \Delta L_2) \quad (1.5.15)$$

探测器的符合计数率  $R$  满足:

$$R \propto |1 + e^{i\Delta\phi}|^2 = 2 + 2\cos\left[\frac{\omega_p}{2c} (\Delta L_1 + \Delta L_2)\right] \quad (1.5.16)$$

理论上干涉的可见度应是 100%, 实际上实验达到的是 80.4%。

在此后一个类似的实验<sup>[27]</sup>中, 两个能量相同的下转换光子从非线性晶体同时发出, 在光纤中各自传播达到相距 10.5km 的两个干涉仪。观测到的二光子干涉可见度达 81.6%。缠绕态能够保持如此远的距离, 不仅在理论上证实了量子力学关联(并非鬼怪式的相互作用), 而且对量子信息学(量子密码与量子远程传递)也有实际意义。

现在可以回到 1.4 节讨论的经典光源问题。通常具有大量能发出辐射的原子的光源被认为是经典源。发出辐射原子数量很少的源不能认为是经典源, 因为经典电磁理论已不适用于描述这类光源, 而应该用量子场论来描述。曼德尔<sup>[24]</sup>发现场论的结果和经典电磁理论的结果相差很多。在原子数目较多的极限下, 两种理论趋于一致, 这是可以预期的。出人意料的是, 当原子数目不多但具有泊松涨落时, 量子理论的预言也和经典理论一致。因此, 不论一个热光源是多么弱, 它也是一个经典光源, 其反符合系数  $\alpha$  接近 1, 起关键作用的是涨落。

#### 1.5.4 相干与路径可区分性

费曼有一句格言: “只有在一个装置中无法在物理上互相区分的状态才能干涉。”邹兴宇、王力军和曼德尔的实验<sup>[28]</sup>对这个原则给予了明确的证明。图 1.21(b)的虚线 A 和 C 是分束器, 入射的紫外光子在 A 处分为二束, 各经反射进入非线性晶体  $X_1$  和  $X_2$ 。每个光子只能在一块晶体( $X_1$  或  $X_2$ )中产生下转换, 所以产生的是缠绕态:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|d\rangle_1 |e\rangle_2 + |h\rangle_1 |k\rangle_2)$$

束  $d$  和  $h$  都能进入  $D_1$ 。它们能干涉吗? 如果能对  $e$  和  $k$  分别进行监察, 就能判断  $D_1$  接收的是从哪一个晶体来的下转换光子: 如果  $e$  有计数, 则进入  $D_1$  的一定是  $d$ ; 如果  $k$  有计数, 则进入  $D_1$  的一定是  $h$ 。这样就不会有干涉。如果将  $e$  和  $k$  的路线重叠起来, 就失去了判断的潜在可能, 从而出现干涉。此时的状态

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|d\rangle + |h\rangle)_1 |k\rangle_2$$

是乘积态而不是缠绕态。此时调节移相器 P 就会出现  $D_1$  中的干涉。具体分析如下: 在分束器 A(半透明)处, 束  $a$  变为束  $b$  与束  $c$  的线性组合, 即

$$|a\rangle \rightarrow \frac{|b\rangle + i|c\rangle}{\sqrt{2}}$$

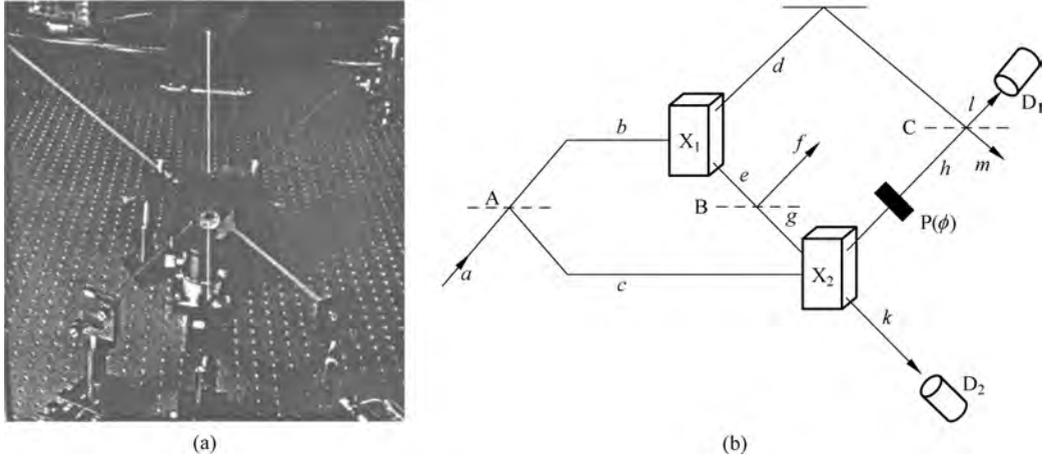


图 1.21 邹兴宇、王力军和曼德尔干涉仪的实验图和示意图

(a) 实验图; (b) 示意图

此处  $i$  表示反射束有  $\pi/2$  相移。在 B 处(为了以下讨论,以实数  $T$  和  $R$  表示其透射和反射率),

$$|e\rangle \rightarrow T|g\rangle + iR|f\rangle$$

在 C(半透明)处

$$|h\rangle \rightarrow \frac{|l\rangle + i|m\rangle}{\sqrt{2}}, \quad |d\rangle \rightarrow \frac{|m\rangle + i|l\rangle}{\sqrt{2}}$$

在移相器 P 处

$$|h\rangle \rightarrow e^{i\phi}|h\rangle$$

在下转换晶体处(令  $\eta$  为下转换系数,为  $10^{-6}$  量级),

$$|b\rangle \rightarrow \eta|d\rangle_1|e\rangle_2,$$

$$|c\rangle \rightarrow \eta|h\rangle_1|k\rangle_2$$

将  $|g\rangle$  和  $|k\rangle$  准直,有

$$|g\rangle \rightarrow |k\rangle$$

将以上各过程总结,有

$$\begin{aligned} |a\rangle &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|b\rangle + i|c\rangle) \rightarrow \frac{\eta}{\sqrt{2}}(|d\rangle_1|e\rangle_2 + i|h\rangle_1|k\rangle_2) \\ &\rightarrow \frac{\eta}{2}[(T - e^{i\phi})|m\rangle + i(T + e^{i\phi})|l\rangle]_1|k\rangle_2 + \\ &\quad i\frac{\eta}{2}R(|m\rangle + i|l\rangle)_1|f\rangle_2 \end{aligned} \quad (1.5.17)$$

求  $D_1D_2$  的符合计数率,通过选取式(1.5.17)中  $|l\rangle_1|k\rangle_2$  的系数,取其模平方即可:

$$\frac{\eta^2}{4}[(T + \cos\phi)^2 + \sin^2\phi] = \frac{\eta^2}{4}(1 + T^2 + 2T\cos\phi)$$

干涉条纹对比度为

$$\mathcal{V} = \frac{2T}{1 + T^2} \quad (1.5.18)$$

随  $T$  的增加而增加,从  $T=0$  的  $\mathcal{V}=0$  开始直到  $T=1$  的  $\mathcal{V}=1$ 。如果只测探测器  $D_1$  的计数

率,则它是  $|l\rangle_1|k\rangle_2$  与  $|l\rangle_1|f\rangle_2$  的系数模平方之和:

$$\begin{aligned} \frac{\eta^2}{4}[(T + \cos\phi)^2 + \sin^2\phi] + \frac{\eta^2}{4}R^2 &= \frac{\eta^2}{4}[1 + T^2 + 2T\cos\phi + R^2] \\ &= \frac{\eta^2}{2}(1 + T\cos\phi) \end{aligned}$$

最后的等式来源于  $T^2 + R^2 = 1$ , 这时干涉条纹的可见度为

$$\mathcal{V} = T \quad (1.5.19)$$

考虑到实际的实验参数,即入射光能量在晶体中下转换的比例分数、泵浦波的强度和交叉关联,与  $T$  成正比关系的比例常数仅在极端情况下才为 1<sup>[28]</sup>,实验结果示于图 1.22。

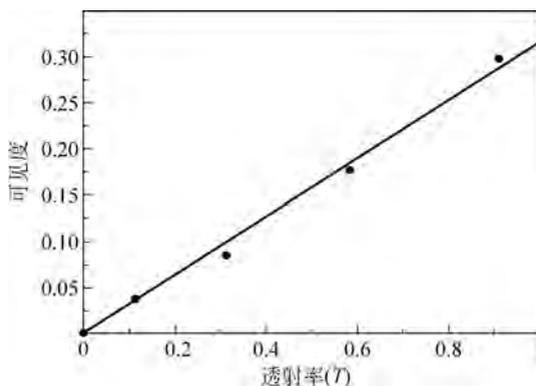


图 1.22 可见度与透射率的关系

取自文献[28]

重要的是,虽然  $D_2$  这一束并不在相干路径内,它却能影响  $D_1$  这一束的干涉条纹可见度。 $D_2$  这一束的作用是:使“从哪一条路来”(从  $X_1$  还是从  $X_2$ )的判断成为不可能。一对下转换光子(或称“共轭光子”)是相互关联的,操纵一个就能影响第二个。 $T=0$  导致  $\mathcal{V}=0$ ,是因为阻挡  $e$  束就能根据  $k$  束有无光子判断  $D_1$  中的光子是来自  $X_1$ ( $k$  束无光子)还是  $X_2$ ( $k$  束有光子),这样  $D_1$  就不可能看到干涉条纹。在图 1.23 中,探测器  $D_1$  中的计数率  $R_c$  绘为曲线 A。它是图 1.21(b)中分束器 C 位移的函数,或等价地是图 1.21(b)中相移器相位  $\phi$  的函数。当辅助束  $e$  被阻挡时( $T=0$ )计数率绘为曲线 B。

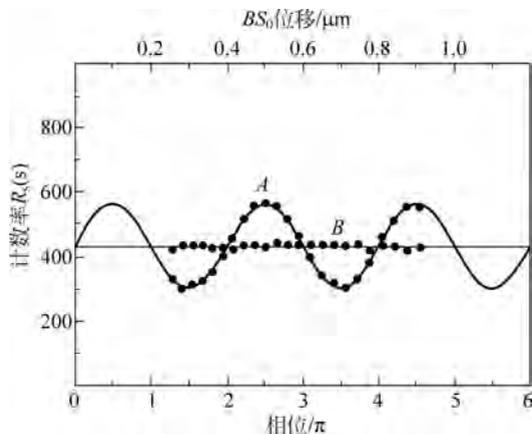


图 1.23  $D_1$  中的计数率

这个实验再次指明, 毁掉相干的原因是潜在的信息, 而非必须是实际掌握的信息, 只要不把  $|g\rangle$  和  $|k\rangle$  准直, 式(1.5.17)原有的  $\frac{\eta}{2}i(T+e^{i\phi})|l\rangle_1|k\rangle_2$  就会变为  $\frac{\eta}{2}(ie^{i\phi}|l\rangle_1|k\rangle_2 + iT|l\rangle_1|g\rangle_2)$ 。再求  $D_1D_2$  符合, 就只有  $\eta^2/4$ , 不用实际去测  $|g\rangle$  和  $|k\rangle$ , 相干就丢了。

## 1.6 双光子干涉仪量子涂消器

在 1.3 节中讨论了量子涂消器的概念, 真正实现的首先是乔瑞宇研究组的双光子干涉仪<sup>[29]</sup>, 图 1.24 是实验装置的示意图。氩离子激光器 351.1nm 的泵浦光子在非线性晶体 KDP 中下转换为两个平均值为 702.2nm 的共轭光子, 用滤波器限制带宽为 10nm。两个关联光子通过反射镜同时射到分束器上, 两个输出道  $D_1, D_2$  测量单独计数和两道的符合计数。图 1.25(a)是简化的干涉仪图, 图 1.25(b)是对符合计数有贡献的路径: 两个光子在分束器处或者都是反射( $r \times r$ )或都是透射( $t \times t$ )。当两路程差为 0 时, 符合计数是

$$P_c = |r \times r + t \times t|^2 = \left| \frac{i}{\sqrt{2}} \times \frac{i}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \times \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = 0 \quad (1.6.1)$$

因子  $i$  来自分束器处反射带来的相位差  $\pi/2$ 。当程差比相干长度大得多时,  $r \times r$  和  $t \times t$  两路不再相干, 计数率是二者的模方之和:

$$P_c = \frac{1}{2} \quad (1.6.2)$$

由于每个光子在分束器处反射与透射的概率都是 50%, 符合计数应占 1/2, 另外 1/2 是两个光子进入同一个探测器的情况。实际上在分束器后的波函数为

$$\begin{aligned} |\psi\rangle_{\Delta x=0} &= \frac{1}{2} [ |1_1 1_2\rangle + i^2 |1_1 1_2\rangle + i |2_1 0_2\rangle + i |0_1 2_2\rangle ] \\ &= \frac{i}{2} [ |2_1 0_2\rangle + |0_1 2_2\rangle ] \end{aligned} \quad (1.6.3)$$

福克(Fock)态  $|nm\rangle$  代表向探测器  $D_1$  传播的有  $n$  个光子, 向  $D_2$  传播的有  $m$  个光子。 $\Delta x=0$  代表程差为 0。如果移动图 1.24 中的棱镜以调整两个路径的程差  $\delta L$ , 则符合计数概率将从 0 增加, 直到程差趋近相干距离, 符合计数率趋向 1/2 并与程差无关, 这时干涉消失。

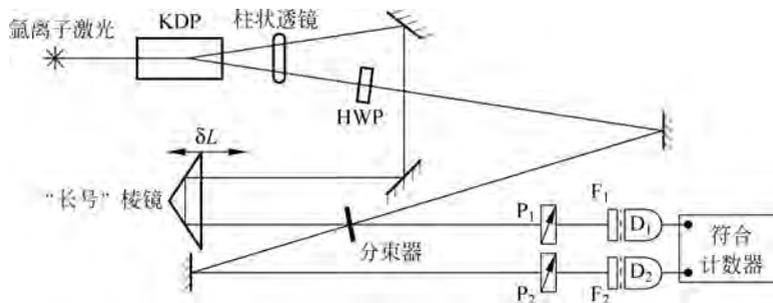


图 1.24 观察量子涂消的干涉仪装置示意图

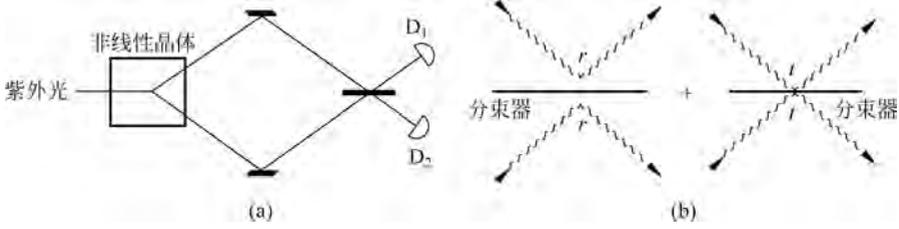


图 1.25 干涉简图和对符合计数有贡献的路径

(a) 干涉简图; (b) 对符合计数有贡献的路径

从式(1.6.3)可见,在程差为0时两个纠缠光子在同一方向离开分束器(去往探测器1或探测器2)。这个现象是由曼德尔等人<sup>[22]</sup>最初发现的,此后被称为“光子聚团”(photon coalescence)。有趣的是,两个独立的光子也有同样现象。例如在1.5节中提到的勒格罗等人<sup>[23]</sup>的量子拍频实验。两个光子脉冲相继被记录到。第一个光子测量将两个光子缠绕起来,这就决定了第二个光子被任意一个探测器接收到的概率。相同频率的光子聚团最为明显。

下转换产生的两个光子都是水平偏振的。如果在一束中放置半波片,其光轴与水平偏振方向成 $\phi/2$ 角(图1.24中的HWP),这个光子的偏振方向就和水平成 $\phi$ ,如果 $\phi/2=45^\circ$ ,则偏振就变为垂直方向了。这样偏振就成为一个新的参数,可以用来辨认进入任何一个探测器的光子是从“哪一个路径”来的。可以预料,干涉现象将会消失。令 $H$ 代表水平偏振, $V$ 代表垂直偏振。光子通过半波片偏振变为 $H+\phi$ ,即偏振与水平成 $\phi$ :

$$|1^{H+\phi}\rangle = |1^H\rangle \cos\phi + |1^V\rangle \sin\phi \quad (1.6.4)$$

放置半波片后在分束器后面的波函数为

$$|\psi\rangle_{\Delta r=0} = \frac{1}{2} [ |1_1^H 1_2^{H+\phi}\rangle + i^2 |1_1^{H+\phi} 1_2^H\rangle + i |1_1^{H+\phi} + 1_1^H, 0_2\rangle + i |0_1, 1_2^H + 1_2^{H+\phi}\rangle ] \quad (1.6.5)$$

再用式(1.6.4)与式(1.6.5)中的 $|1_1^H 1_2^H\rangle \cos\phi$ 两项对消,余下的项为

$$|\psi\rangle_{\Delta r=0} = \frac{1}{2} [ |1_1^V 1_2^H\rangle \sin\phi - |1_1^H 1_2^V\rangle \sin\phi + i |2_1^H 0_2\rangle \cos\phi + i |1_1^V + 1_1^H, 0_2\rangle \sin\phi + i |0_1 2_2^H\rangle \cos\phi + i |0_1 1_2^H + 1_2^V\rangle \sin\phi ] \quad (1.6.6)$$

只有前两项与符合测量有关,因为其他福克态是 $|02\rangle$ 或 $|20\rangle$ 。符合测量的结果为

$$P_c = \frac{1}{4} [2\sin^2\phi] = \frac{1}{2} \sin^2\phi \quad (1.6.7)$$

这个结果是取了式(1.6.6)中 $|1_1^V 1_2^H\rangle$ 和 $|1_1^H 1_2^V\rangle$ 的系数,将它们平方再相加得来的。这两个状态都是两个探测器中各有1个光子,为什么没有干涉项呢?原因是这两个状态是正交的——偏振态正交。这是加了半波片的结果:它使两个状态正交,因而干涉为0,这和提供分辨“从哪条路来”的潜在可能是共生的。不论测量与否,结果总是一样的。在图1.26(a)中半波片方向的不同导致对干涉的不同效应。在图1.26(b)中绘出了半波片角度函数的可见度。

进行量子涂消就是反其道而行之。在两个探测器前面各放一个检偏器 $P_1$ 和 $P_2$ ,检偏方向分别为 $\theta_1$ 和 $\theta_2$ 。设原来的半波片放置于 $\phi/2=45^\circ$ ,则式(1.6.6)变为

$$|\psi\rangle_{\Delta r=0} = \frac{1}{2} [ -|1_1^V 1_2^H\rangle + |1_1^H 1_2^V\rangle + \dots ] \quad (1.6.8)$$

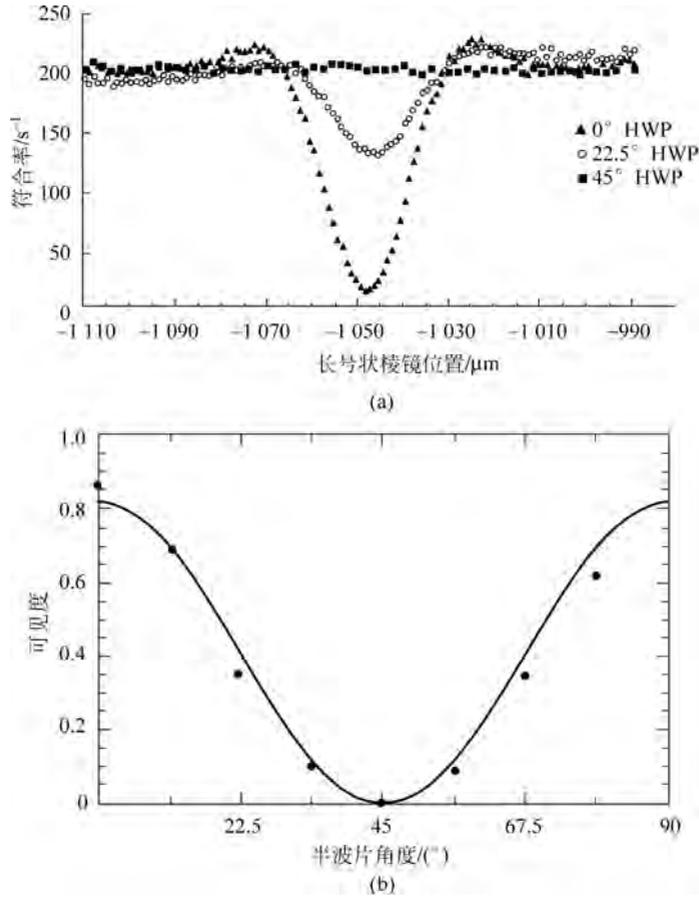


图 1.26 不同半波片方向对干涉产生的不同效应和半波片角度函数的可见度  
取自文献[29]

(a) 不同半波片方向下表现干涉的符合计数率急降的轮廓; (b) 半波片角度函数的可见度

检偏器的作用是求出式(1.6.8)态在

$$\langle \theta_1 | = \langle 1_1^H | \cos\theta_1 + \langle 1_1^V | \sin\theta_1$$

和

$$\langle \theta_2 | = \langle 1_2^H | \cos\theta_2 + \langle 1_2^V | \sin\theta_2$$

上的投影。结果是

$$\begin{aligned} \langle \theta_1 \theta_2 | \psi \rangle_{\Delta r=0} &= \frac{1}{2} (\cos\theta_1 \sin\theta_2 - \sin\theta_1 \cos\theta_2) \\ &= \frac{1}{2} \sin(\theta_2 - \theta_1) \end{aligned}$$

以及

$$P_c(0) = |\langle \theta_1 \theta_2 | \psi \rangle_{\Delta r=0}|^2 = \frac{1}{4} \sin^2(\theta_2 - \theta_1)$$

如果  $\theta_1 = \theta_2$ , 则  $P_c(0) = 0$  完全恢复了量子干涉的值。如果程差大于相干长度, 则式(1.6.8)的两项不再相干, 求  $P_c$  时须将它们分别投影到  $\langle \theta_1 \theta_2 |$ , 取模方再相加:

$$\begin{aligned}
 P_c(x > c\tau) &\approx \left| \frac{1}{2} \langle \theta_1 \theta_2 | 1_1^H 1_2^V \rangle \right|^2 + \left| \frac{1}{2} \langle \theta_1 \theta_2 | 1_1^V 1_2^H \rangle \right|^2 \\
 &= \frac{1}{8} \{ \sin^2(\theta_2 - \theta_1) + \sin^2(\theta_2 + \theta_1) \}
 \end{aligned} \quad (1.6.9)$$

由于半波片的作用,在  $D_1, D_2$  两个探测器道都有“哪一条路径”的信息,必须在两个探测器前都放置检偏器才能消去信息。另有很重要的一点:涂消是在干涉仪的输出口之后进行的,刚刚在两个探测器进行符合测量时恢复了干涉效应。检偏器角度的设置完全决定了这一对共轭光子的表现。理论与实验的比较示于图 1.27。图 1.27(a)是理论曲线,给出了两个检偏器设置角度不同时涂消的结果。图 1.27(b)中的点是实验数据,曲线是理论计算修正到可见度为 91%的结果。远离曲线最低点没有干涉现象,因此方位角无关紧要。在最低点附近,光子 2 极化的非定域塌缩导致了正弦曲线公式的变化。棱镜移动由步进压电电机完成,它的位置分辨率是  $0.13\mu\text{m}$ 。

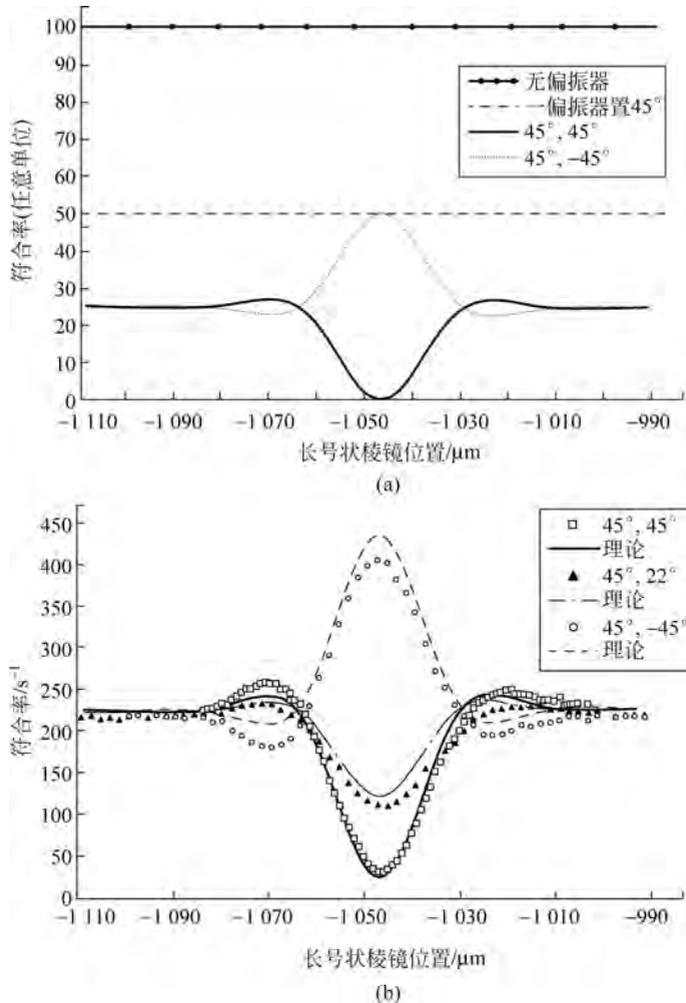


图 1.27 涂消器的理论与实验比较

(a) 检偏器的角度不同设置的涂消结果(理论); (b) 实验数据,理论曲线已调整到可见度为 91%

史砚华等人<sup>[30]</sup>进行了一个推迟选择的量子涂消器实验,选择通过在分束器上的光子随机地做出,原理示于图 1.28。标记为 A 或 B 的原子由弱激光器激发。激发原子(A 或 B)通过级联衰变发射一对缠绕光子。向右方传播的光子 1 由探测器  $D_0$  记录。 $D_0$  沿  $x$  轴方向扫描观察干涉条纹。向左方传播的光子 2 遇到 50/50 分束器。如果光子 2 是从原子 A 发射的,它将沿路径 A 遇到分束器 BSA,以 50% 的概率反射或透射。如果它是从原子 B 发射的,就将沿路径 B 遇到分束器 BSB,以 50% 的概率反射或透射。如果光子在分束器上透射,它将到达探测器  $D_3$  或  $D_4$ 。由原子级联衰变产生的这对光子是处于缠绕态的:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |1\rangle_A |2\rangle_A + |1\rangle_B |2\rangle_B ]$$

在探测器  $D_3$  或  $D_4$  记录到光子就能提供光子 2 的走“哪一条路径”的信息,而光子 1 的路径也因此成为已知。

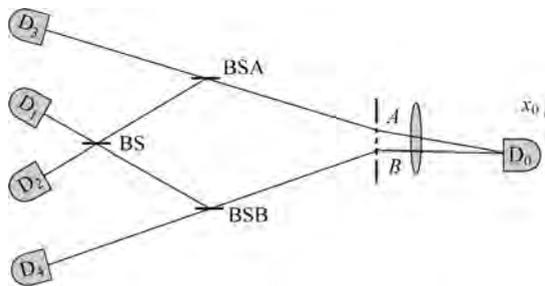


图 1.28 量子涂消器实验

取自文献<sup>[30]</sup>

如果在任意一个分束器上光子 2 反射,它将遇到另一个 50/50 分束器 BS 而被探测器  $D_1$  或  $D_2$  探测到。由于分束器 BS 的存在,探测器  $D_1$  或  $D_2$  的触发涂消了光子 1 走“哪一条路径”的信息。因此可以通过设计光子的关联安排干涉的消失或恢复。两个光子的状态可以重新表述为

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |1\rangle_+ |2\rangle_+ + |1\rangle_- |2\rangle_- ]$$

此处

$$|1\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |1\rangle_A \pm |1\rangle_B ], \quad |2\rangle_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |2\rangle_A \pm |2\rangle_B ]$$

这些状态都代表同一个光子两个状态的相干叠加,正是典型的双缝波函数。 $D_1$  或  $D_2$  记录到光子 2 导致波函数塌缩,显示光子 1 的状态由  $|1\rangle_+$  或  $|1\rangle_-$  给出,保持了干涉条纹。

实验设计中原子 A, B 和  $D_0$  的距离远小于 A, B 和分束器 BSA, BSB 的距离,有无路径信息的选择由光子 2 随机实现。在光子 1 触发探测器  $D_0$  之后,光子 2 仍然在去往分束器的途中。这个推迟选择是上面讨论过的惠勒的主旋律的更强的“变奏”。 $D_0$  与探测器  $D_i$  ( $i=1, 2, 3, 4$ ) 中任意一个的延迟符合计数率(记为  $R_{0i}$ )保证事件是由一对光子生成的。 $R_{01}$  与  $R_{02}$  的联合计数率显示  $D_0$  坐标  $x$  的函数的干涉图样。这反映了光子 1 的波动性。 $R_{03}$  与  $R_{04}$  的联合计数率则不显示干涉图样,因为提供了光子 1 走“哪一条路径”的信息。

在实际实验中,泵浦激光束通过双缝在 BBO 晶体中形成 A 与 B 两个区域。从 A 或 B 产生一对下转换光子。光子 2 的到达比信号光子 1 迟  $7.7\text{ns}$ 。图 1.29 给出了实验安排。

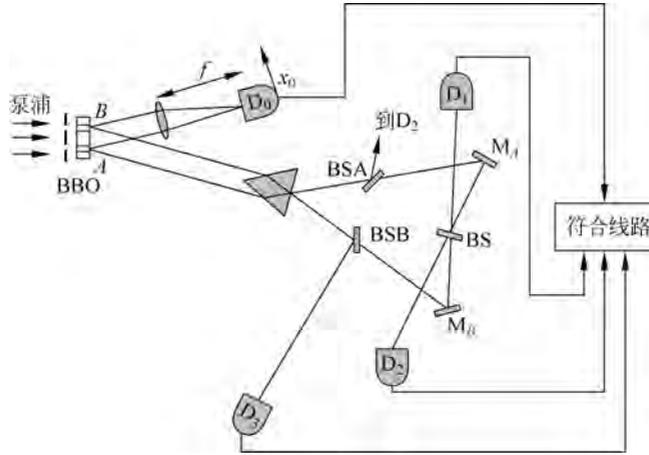


图 1.29 实验安排

取自文献[30]

图 1.30 给出了作为  $x$  函数的  $R_{01}$  与  $R_{02}$ , 观察到标准的杨氏干涉图样。它们是共轭的干涉条纹, 相移为  $\pi$ 。它们之和当然是没有结构的常数值(图 1.31)。图 1.32 给出的  $R_{03}$  不显示干涉。

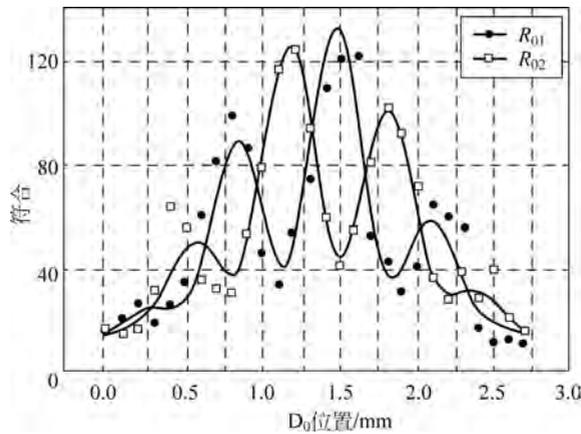
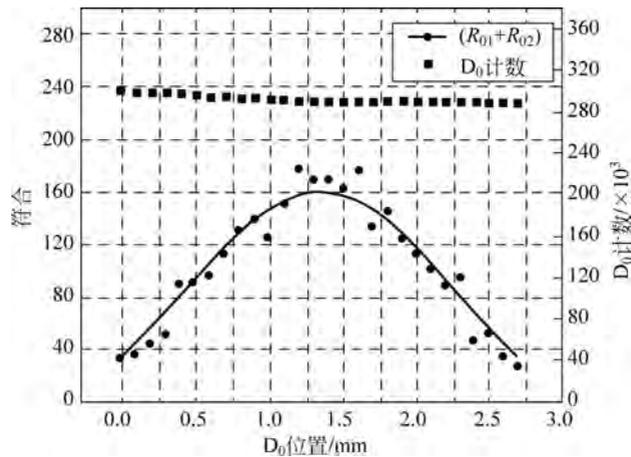


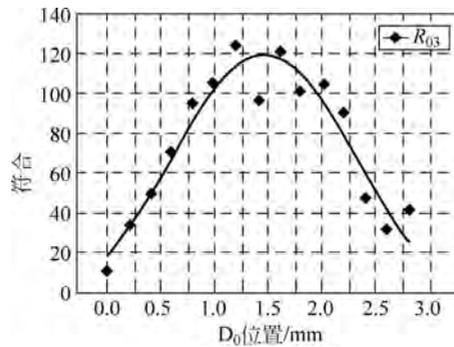
图 1.30  $R_{01}$  与  $R_{02}$  的共轭条纹

取自文献[30]

推迟选择涂消器的概念曾引起过不少争论,因为在过去记录下的光子 1 如何能受光子 2 在未来的行为影响? 事实上, 纠缠态  $|\psi\rangle$  是决定物理状态的。究竟选择第一方案(确定“哪一条路径”)还是第二方案(两条路径),是由光子 2 的行为随机选定的。实际上,在实验完成之后把  $D_1 \sim D_4$  各探测器记录的数据分类处理才能把物理的全部内容揭示出来。单独由  $D_0$  记录的数据(图 1.31)给不出什么信息。

图 1.31  $R_{01}$  与  $R_{02}$  之和不呈现干涉

取自文献[30]

图 1.32  $R_{03}$  不呈现干涉

取自文献[30]

## 1.7 爱因斯坦和玻尔关于量子力学的争论,贝尔定理

20世纪两位最伟大的物理学爱因斯坦和玻尔曾在1930年和1935年就量子力学进行过两次争论。1935年的争论被称为“EPR佯谬”。关于这个问题的讨论从1965年起又成为非常热门的话题,研究工作空前地兴旺起来。原因是最初的争论仅限于理论概念和“假想实验”,而贝尔在1965年的一篇论文却提出了基于爱因斯坦观点的“隐变量理论”可以用实验检验,其判据后来被称为“贝尔不等式”。从20世纪60年代后期起进行了许多验证不等式的实验。20世纪80年代所进行的实验已经基本上达到过去只能在理论上讨论的“想象中实验”的水平。这些理论和实验的发展使人们对量子力学的基本问题有了进一步的认识,研究仍在继续。

### 1.7.1 1930年爱因斯坦对量子力学的批评:“量子力学是不自洽的。”

1930年在布鲁塞尔举行的塞尔维(Solvay)讨论会上,爱因斯坦提出一个假想实验。在一个密闭的盒中有辐射存在,事先测好盒的质量。由一个预先设计好的钟表机构开启盒上

的快门, 经短时间  $T$  后关闭。在此期间有一个光子逸出。快门关闭后再测盒的质量, 两次测量值之差正好是逸出光子的能量  $E$ 。由于时间  $T$  (由钟表机构测量) 和光子能量 (由盒的质量变化测量) 两种测量是独立的、互不干扰的, 测量精确度不互相制约, 因而破坏了  $\Delta T \cdot \Delta E \geq \hbar$  的不确定关系, 他的结论是“量子力学是不自洽的”。对这个批评玻尔一时感到很困惑。对量子力学不确定性原理的正确性, 玻尔是深信不疑的, 但一时又找不到爱因斯坦论据的错误。经过一夜苦思, 第二天玻尔在黑板上画了这个假想的实验装置(图 1.33)。玻尔指出, 必须对测量过程做认真分析, 才能找出时间和能量测量精确度之间的关系。在光子逸出时(时间测量), 盒子获得一个向上的动量:

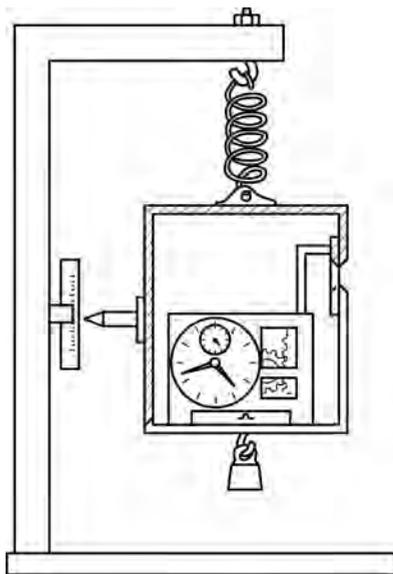


图 1.33 爱因斯坦之盒

$$p \leq T \frac{E}{c^2} g \quad (1.7.1)$$

此处  $g$  为重力加速度, 而动量的不确定值为

$$\Delta p \leq T \frac{\Delta E}{c^2} g \quad (1.7.2)$$

盒子的两次平衡位置之差  $\Delta x$  是和  $\Delta p$  有关的:

$$\Delta p \geq \frac{\hbar}{\Delta x} \quad (1.7.3)$$

因此

$$\hbar \leq T \frac{\Delta E}{c^2} \Delta x g \quad (1.7.4)$$

$T$  的测量不确定值是由位置不确定值  $\Delta x$  引起的引力势不同, 从而影响钟表快慢所致。据引力红移公式:

$$\frac{\Delta T}{T} = \frac{g \Delta x}{c^2} \quad (1.7.5)$$

将式(1.7.5)代入式(1.7.4)即得出

$$\Delta E \Delta T \geq \hbar \quad (1.7.6)$$

玻尔用爱因斯坦自己提出的引力红移回敬了他, 说明量子力学是自洽的。从此爱因斯坦没有再提不自洽性的问题。

### 1.7.2 Einstein-Podolsky-Rosen 佯谬: “量子力学描述是不完备的。”

1933年爱因斯坦等三人提出了对量子力学新的批评<sup>[31]</sup>, 文献中将此称为“EPR 佯谬”。他们三人在分析量子力学理论是否完备时, 考察了一个由两个粒子组成的一维系统, 并提出了用于判断这个问题的 3 个前提: ①对于任何两个互不接触且不可能直接作用的系统, 对其中任何一个系统的测量, 量子力学的预言是正确的。②要是对于一个系统没有干扰, 我们

能够确定地预测(概率等于 1)一个物理量的值,那么对应于这一物理量,必定存在着一个物理实在的元素。③对于任何两个分开的系统,对其中一个系统做的任何物理操作不应立刻对另一个系统有任何影响,也可以说自然界没有超距作用。这就是历史上有名的爱因斯坦可分隔原则。现在考虑由两个粒子组成的一维系统。显然,粒子 1 的  $x_1$  和  $p_1$ , 粒子 2 的  $x_2$  和  $p_2$  互不对易。但是我们发现  $x_1 - x_2$  和  $p_1 + p_2$  这两个算符是互相对易的,由此可以找到一个态函数,它同时是算符  $x_1 - x_2$  的本征值为  $a$  和算符  $p_1 + p_2$  的本征值为 0 的本征函数,即  $\delta(x_1 - x_2 - a)$ 。如果测得粒子 1 的坐标  $x_1$  为  $x$ ,那么便可以确定粒子 2 的坐标  $x_2$  必为  $x - a$ 。另一方面,测得粒子 1 的动量  $p_1$  为  $p$ ,由此可以确定粒子 2 的动量  $p_2$  必为  $-p$ 。若设  $a$  为足够大,则对粒子 1 的任何物理操作,并不对粒子 2 引起任何干扰。按照上述三个前提之②,可断定对应于  $x_1, p_1, x_2, p_2$ ,存在着 4 个独立的物理实在的元素。而量子力学则指出, $x_1$  与  $p_1, x_2$  与  $p_2$  是不对易的,因此两对量各自只有一个独立的物理实在的元素与其对应。所以整个系统只能有两个独立的物理实在的元素与其对应。三人由此断言,量子力学理论的描述是不完备的。为了使所讨论的问题与实验更接近,我们介绍另一个版本的 EPR 佯谬,即玻姆(D. Bohm)版本的 EPR 佯谬<sup>[32]</sup>,并就此进行详细分析。

玻姆版本的 EPR 佯谬将原佯谬的系统中两个粒子的坐标和动量改换为三个自旋分量来考虑。设由两个自旋为 1/2 的粒子组成一个系统,处于总自旋为 0 的状态(单态)。其自旋波函数为

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}[u_{\uparrow}(1) \times u_{\downarrow}(2) - u_{\downarrow}(1) \times u_{\uparrow}(2)] \quad (1.7.7)$$

式中, $u_{\uparrow}$  和  $u_{\downarrow}$  分别代表自旋分量为 1/2 和 -1/2 的旋量波函数。自旋量子化轴  $\hat{n}$  的方向是任意的。该系统处于单态意味着两个粒子处于自旋反平行的状态。设两个粒子相距甚远,由式(1.7.7)可知,测量粒子 1 自旋  $x$  分量的结果是 1/2 或 -1/2,概率各占一半。同时由式(1.7.7)可以判断,若粒子 1 的自旋  $x$  分量的测量值为 1/2,与此相应,粒子 2 的自旋  $x$  分量必然是 -1/2;若粒子 1 的自旋  $x$  分量的测量值为 -1/2,与此相应,粒子 2 的自旋  $x$  分量必然是 1/2。因此,一个观测者可以不干扰粒子 2,就能确定地预言它的自旋  $x$  分量。根据同样的操作,观测者可以不干扰粒子 2,就能确定地预言它的自旋  $y$  分量和自旋  $z$  分量。

对此,按照 EPR 佯谬前提来分析,根据前提②,由于测量  $S_x(1), S_y(1), S_z(1)$  可以不对粒子 2 作任何干扰(前提③:没有超距作用),便能确切地预言  $S_x(2), S_y(2), S_z(2)$ 。根据前提②可以得出结论,与粒子 2 的  $S_x(2), S_y(2), S_z(2)$  相对应,存在 3 个独立的物理实在的元素。但是,根据量子力学的原则, $S_x(2), S_y(2), S_z(2)$  互不对易,因此,不可能具有与之相对应的 3 个独立的物理实在的元素,而只能有 1 个物理实在的元素。如果由 EPR 佯谬的三个前提分析,可以得出结论,量子力学理论的描述是不完备的。

三个前提中,前提②是有问题的,该前提中有“我们能够确定地预测”的提法。要想确定地预测  $S_x(2)$ ,就必须安排实验测定  $S_x(1)$ 。此时我们就不能预测  $S_y(2)$  和  $S_z(2)$ 。玻尔在对 EPR 佯谬挑战的回答<sup>[33]</sup>中指出:“对粒子 1 的测量正是影响了对确定体系未来行为所做出的预言类型的条件。”这句话的意思是:对粒子 1 做  $S_x(1)$  测量,就确定了对粒子 2 未来行为做出预言的类型,即  $S_x(2)$ ,而不能是  $S_y(2)$  或  $S_z(2)$ 。由于决定自旋 3 个分量的安排是互相排斥的,因此只能确切预言粒子 2 的一个自旋分量,而不是 3 个,结论是不存在量子力学描述不完备的问题。

值得注意的是,在前提②中有“不对系统做任何干扰”的提法。在量子力学早期的文献或教科书中常把物理量  $A$  与  $B$  不能同时具有确定值归结为在测量  $A$  时干扰了粒子,影响了确定  $B$  的值。因此 EPR 佯谬强调的是既然没有干扰粒子 2,那么它所有的物理量都有确定值。海森堡和爱因斯坦讨论量子力学矩阵表述时说,只有可观测量才能进入理论。爱因斯坦<sup>[34]</sup>说:“哪些量是可观测量不应是我们的选择,而应由理论给出,由理论向我们提示。”自旋的 3 个分量能否同时存在相应的物理实在元素,不能人为地把经典力学搬到微观体系来认定,而应通过实验来考验量子力学理论的结果。在认定自旋的 3 个分量存在着相应的物理实在的元素这类问题上,爱因斯坦并未遵守他自己做出的正确判断。罗森菲尔德(L. Rosenfeld)评论<sup>[34]</sup>:“这是一个很聪明的见解,或许爱因斯坦自己应该记住的。”

在两个粒子相距很远时,对一个粒子的不同测量结果立即可以预言另一个粒子的不同性质。这是由角动量守恒通过波函数产生关联而产生的。对一个粒子进行测量,就从系统波函数中析出相关的部分(波函数编缩),其中包含了另一个粒子的信息,而不是对一个粒子进行的测量能对另一个粒子传递什么信息。果真如此,倒真是超距作用了,EPR 佯谬的第三个前提就是为此提出的。本章 1.9 节的推迟选择实验结果证明了在进行测量中不存在传递信息的问题。在 2.2.2 节讨论了纠缠态施密特(Schmidt)分解后还会进一步分析,对一个粒子进行测量没有信息传递给第二个粒子。

由于不能接受对量子力学关联(缠绕态)的描述,同时认为对第二个粒子信息的获得是一种物理上作用的结果,爱因斯坦把这种实际上不存在的作用称为“鬼怪式(spooklike)的超距作用”。“定域相互作用”在经典场论和量子场论中是被物理学家广泛接受的。但爱因斯坦提出“可分隔原则”反对超距作用。实际上,是否通过叠加原理建立量子力学关联,才正是量子力学的重要特征。爱因斯坦等三人提出的问题实际上不是佯谬,而是对建立一种新的理论的建议。他们的观点引出了大量的“隐变量理论”研究,这类理论认为量子力学的描述是不完备的。在标明系统状态的力学变量(它们都具有确定值)中,有一些在量子力学中是不出现的,它们被称为“隐变量<sup>[35]</sup>”。例如量子力学标明自旋状态,可以用  $S^2$  和  $S_z$ ,这里  $S_x$  和  $S_y$  就是隐变量。量子力学中对隐变量的测量值实际上是对一定系综的统计平均值。隐变量理论可以分成两类:一类企图重现量子力学的所有可观测量结论,这时一些力学量会具有很奇特的性质,或需要引入很奇特的相互作用;另一类从一些基本原则出发(EPR 佯谬的 3 个前提),在一些简单情况下能重现量子力学的结果,但在有些情况下会得出不同于量子力学的结论。这些理论可以通过实验判明,是更引人注意的。在文献中称这类理论为“定域的(前提③)和实在性的(前提②)隐变量理论”,或“定域的、决定论的理论”。对 EPR 佯谬的挑战,多数物理学家持玻尔的观点,因此,长时间以来这个问题是物理学家谈论的话题,但并未进入物理学研究的主流。这种情况在 1965 年发生了变化,起决定作用的是贝尔的研究工作。

### 1.7.3 贝尔定理

隐变量理论能否和量子力学中力学量的对易关系相协调?关于此有过许多讨论。贝尔在 1965 年提出一个定理,现被称为“贝尔定理<sup>[36]</sup>①”:要构造一个定域的、决定论的隐变量理论且能和所有的量子力学预言相符是不可能的。贝尔是就 EPR 佯谬的玻姆版本进行分

① 有关贝尔定理在 1978 年 2 月以前的理论与实验进展总结见 J. F. Clauser 与 A. Shimony 的评述文章<sup>[37]</sup>。

析的。证明如下:令  $A_{\hat{a}}$  和  $B_{\hat{b}}$  分别代表粒子 1 在  $\hat{a}$  方向的自旋分量和粒子 2 在  $\hat{b}$  方向的自旋分量的测量结果,以  $\hbar/2$  为单位,  $\hat{a}$  和  $\hat{b}$  是任意两个单位矢量。考虑  $A_{\hat{a}}$  和  $B_{\hat{b}}$  的乘积。根据量子力学,它是厄密算符  $E(\hat{a}, \hat{b}) = \sigma_1 \cdot \hat{a} \sigma_2 \cdot \hat{b}$  对波函数(式(1.7.7))的平均值,即

$$\begin{aligned} A_{\hat{a}} B_{\hat{b}} &= [E(\hat{a}, \hat{b})]_{\psi} = \langle \psi | \sigma_1 \cdot \hat{a} \sigma_2 \cdot \hat{b} | \psi \rangle \\ &= -\hat{a} \cdot \hat{b} \end{aligned} \quad (1.7.8)$$

特例  $\hat{a} = \hat{b}$  给出

$$[E(\hat{a}, \hat{a})]_{\psi} = -1 \quad (1.7.9)$$

玻姆版本讨论的就是这个特例。量子力学结果(式(1.7.8))是否可以从定域决定论对隐变量作统计平均得到呢?从隐变量理论的观点看,可观测量都具有确定值。量子力学给出的测量结果会有概率分布,这是因为测量的体系是处在不同状态的,它们之间由一隐变量区别。量子力学对此一无所知,也正是由于其描述不完全才给出了概率分布。隐变量理论认为,量子力学中的一个状态,其实是一个包含大量同样体系的系综,体系的自旋状态由  $\lambda$  标定。状态  $\lambda$  张成空间  $\Lambda$ , 状态的分布函数是  $\rho(\lambda)$ , 归一条件是

$$\int_{\Lambda} \rho(\lambda) d\lambda = 1 \quad (1.7.10)$$

理论是定域的,没有超距作用,因此对粒子 1 的测量结果仅依赖于  $\lambda, \hat{a}$ , 而和  $\hat{b}$  无关。同理,对粒子 2 的测量与  $\hat{a}$  无关。因此对任意  $\hat{a}, \hat{b}$  和  $\lambda \in \Lambda$ , 下式成立:

$$(A_{\hat{a}} B_{\hat{b}})(\lambda) = A_{\hat{a}}(\lambda) B_{\hat{b}}(\lambda) \quad (1.7.11)$$

对任意的  $\lambda$ , 力学量都有确定值。对系综作统计平均,得

$$E(\hat{a}, \hat{b}) = \int_{\Lambda} A_{\hat{a}}(\lambda) B_{\hat{b}}(\lambda) \rho(\lambda) d\lambda \quad (1.7.12)$$

在下文中,  $E(\hat{a}, \hat{b})$  代表隐变量理论值,  $[E(\hat{a}, \hat{b})]_{\psi}$  代表量子力学值。贝尔证明在定域性要求(式(1.7.11))下重现量子力学的结果,式(1.7.9)将导致  $E(\hat{a}, \hat{b})$  满足一个不等式。因  $E(\hat{a}, \hat{a}) = -1$ , 式(1.7.11)给出

$$A_{\hat{a}}(\lambda) = -B_{\hat{a}}(\lambda) \quad (1.7.13)$$

令  $\hat{c}$  为另一单位矢量,则有

$$\begin{aligned} E(\hat{a}, \hat{b}) - E(\hat{a}, \hat{c}) &= \int_{\Lambda} [A_{\hat{a}}(\lambda) B_{\hat{b}}(\lambda) - A_{\hat{a}}(\lambda) B_{\hat{c}}(\lambda)] \rho(\lambda) d\lambda \\ &= \int_{\Lambda} A_{\hat{a}}(\lambda) B_{\hat{b}}(\lambda) [1 - A_{\hat{b}}(\lambda) A_{\hat{c}}(\lambda)] \rho(\lambda) d\lambda \end{aligned} \quad (1.7.14)$$

此处用了式(1.7.13)和  $A_{\hat{b}}(\lambda) = \pm 1$  导致的  $A_{\hat{b}}(\lambda) A_{\hat{b}}(\lambda) = 1$  的结果。在式(1.7.14)中,因子  $A_{\hat{a}}(\lambda) B_{\hat{b}}(\lambda)$  对不同的  $\lambda$  可以是 +1 或 -1, 这个因子对积分起到了部分抵消的作用,因此

$$|E(\hat{a}, \hat{b}) - E(\hat{a}, \hat{c})| \leq \int_{\Lambda} [1 - A_{\hat{b}}(\lambda) A_{\hat{c}}(\lambda)] \rho(\lambda) d\lambda$$

再用  $A_{\hat{c}}(\lambda) = -B_{\hat{c}}(\lambda)$  就得到

$$|E(\hat{a}, \hat{b}) - E(\hat{a}, \hat{c})| \leq 1 + E(\hat{b}, \hat{c}) \quad (1.7.15)$$

这是一个贝尔不等式。经过  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$  的巧妙选择, 可以使不等式(1.7.15)和量子力学的结果不同。如图 1.34 中的选择, 量子力学结果是

$$| [E(\hat{a}, \hat{b})]_{\psi} - [E(\hat{a}, \hat{c})]_{\psi} | = | -\hat{a} \cdot \hat{b} + \hat{a} \cdot \hat{c} | = 1$$

但  $1 + [E(\hat{b}, \hat{c})]_{\psi} = 1/2$  明显地破坏了不等式(1.7.15)。通过这个反证证明了贝尔定理。贝尔定理的重要性在于它的普遍性。贝尔不是通过研究某一种隐变量理论而指出其错误, 而是要证明爱因斯坦的定域性和实在性前提在一系列情况下会和量子力学的结论矛盾。

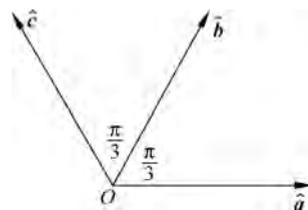


图 1.34 一种  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}$  的选择, 3 个矢量共面

#### 1.7.4 推广到现实系统的贝尔不等式

以上贝尔定理的证明指出了决定论的定域隐变量理论在一定情况下给出和量子力学不同的结果。证明是对理想体系进行的, 但要用于和实验比较, 面对的是实在系统, 证明中所用的部分条件不再成立。探测器效率总是小于 1, 设定  $\hat{a}$  和  $\hat{b}$  的偏振分析器会有衰减, 因此会发生以下 4 种情况: ①两个粒子都被探测到; ②粒子 1 被探测到, 粒子 2 丢失; ③粒子 2 被探测到, 粒子 1 丢失; ④两个粒子都丢失。如果只用第一种情况代表系综去和理论比较, 就必须假设总系综分为 4 个亚系综的相对比例与  $\hat{a}, \hat{b}$  无关。但实验装置和测量过程都不能保证这一点, 因此必须把 4 种情况都包括进来, 此时总系综分布函数  $\rho(\lambda)$  与  $\hat{a}, \hat{b}$  无关。贝尔在 1971 年的证明<sup>[38]</sup>考虑了这一点, 而且将理论推广到可以包括随机变量甚至随机理论, 但保持定域性和实在性条件。每一个测量会有 3 种结果: +1 代表自旋向上, -1 代表自旋向下, 0 代表粒子丢失。即有

$$A_{\hat{a}}(\lambda) = \begin{cases} +1 \\ 0 \\ -1 \end{cases}, \quad B_{\hat{b}}(\lambda) = \begin{cases} +1 \\ 0 \\ -1 \end{cases} \quad (1.7.16)$$

对给定状态  $\lambda$ , 以  $\overline{A_{\hat{a}}}(\lambda)$  和  $\overline{B_{\hat{b}}}(\lambda)$  表示这两个量的期望值。由于粒子可能丢失, 以及理论可以包含随意变量, 因而

$$|\overline{A_{\hat{a}}}(\lambda)| \leq 1, \quad |\overline{B_{\hat{b}}}(\lambda)| \leq 1 \quad (1.7.17)$$

定域性要求给出

$$E(\hat{a}, \hat{b}) = \int \overline{A_{\hat{a}}}(\lambda) \overline{B_{\hat{b}}}(\lambda) \rho(\lambda) d\lambda \quad (1.7.18)$$

此处  $\rho(\lambda)$  与  $\hat{a}, \hat{b}$  无关。令  $\hat{a}', \hat{b}'$  代表对粒子 1 和粒子 2 自旋测量另外的取向。由式(1.7.18)可得

$$E(\hat{a}, \hat{b}) - E(\hat{a}, \hat{b}') = \int \overline{A_{\hat{a}}}(\lambda) \overline{B_{\hat{b}}}(\lambda) [1 \pm \overline{A_{\hat{a}'}}(\lambda) \overline{B_{\hat{b}'}}(\lambda)] \rho(\lambda) d\lambda - \int \overline{A_{\hat{a}}}(\lambda) \overline{B_{\hat{b}'}}(\lambda) [1 \pm \overline{A_{\hat{a}'}}(\lambda) \overline{B_{\hat{b}}}(\lambda)] \rho(\lambda) d\lambda$$

在上式右侧方括号内的正负两项是加进去的, 因为它们与方括号前的因子相乘之后结果正

好抵消。再用式(1.7.17)得到

$$\begin{aligned} |E(\hat{a}, \hat{b}) - E(\hat{a}, \hat{b}')| &\leq \int_A [1 \pm \overline{A_{\hat{a}'}}(\lambda) \overline{B_{\hat{b}'}}(\lambda)] \rho(\lambda) d\lambda + \\ &\int_A [1 \pm \overline{A_{\hat{a}'}}(\lambda) \overline{B_{\hat{b}}}(\lambda)] \rho(\lambda) d\lambda \\ &= 2 \pm [E(\hat{a}', \hat{b}') + E(\hat{a}', \hat{b})] \end{aligned}$$

因此有<sup>①</sup>

$$-2 \leq E(\hat{a}, \hat{b}) - E(\hat{a}, \hat{b}') + E(\hat{a}', \hat{b}) + E(\hat{a}', \hat{b}') \leq 2 \quad (1.7.19)$$

重新定义  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{a}', \hat{b}'$ , 可将式中负号移至任一项之前。式(1.7.19)代表了另一类贝尔不等式。

量子力学给出

$$[E(\hat{a}, \hat{b})]_{\psi} = -C \hat{a} \cdot \hat{b} \quad (1.7.20)$$

由于实际条件,关联不如理想情况完全,这里引入一个正实数  $C \leq 1$ , 仅对理想系统  $C = 1$ 。

取  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{a}', \hat{b}'$  如图 1.35 所示, 便可使量子力学结果破坏贝尔不等式。图 1.35 给出的两种几何条件:

$$[E(\hat{a}, \hat{b}) - E(\hat{a}, \hat{b}') + E(\hat{a}', \hat{b}) + E(\hat{a}', \hat{b}')]_{\psi} = \pm 2\sqrt{2}C \quad (1.7.21)$$

和式(1.7.19)相比,贝尔不等式在  $C$  值相当宽的范围被破坏。从图 1.36 看出,式(1.7.21)左侧的实验值落在  $2 \sim 2\sqrt{2}$  和  $-2 \sim -2\sqrt{2}$  (图中波浪线范围), 说明隐变量理论不能重现量子力学的结果。如果实验值落在  $-2 \sim 2$ , 则不能给出明确结论, 因为该结果可能由测量装置的缺陷使  $C$  值过小所致。

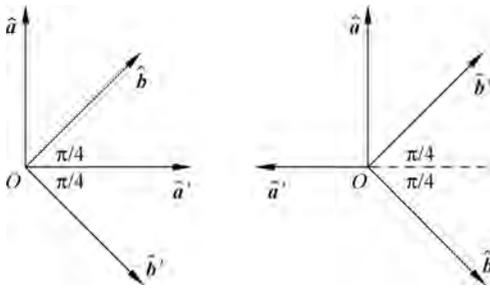


图 1.35 两种  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{a}', \hat{b}'$  的选择, 4 个矢量共面

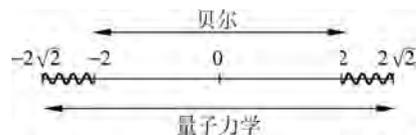


图 1.36 量子力学和隐变量理论比较

贝尔不等式的检验要回答的是能否用定域决定论隐变量理论重现量子力学结果的问题。如果一系列实验证实不等式被破坏, 就代表隐变量理论不能正确描述微观物理世界。

## 1.8 贝尔不等式的实验验证

从以上分析看出, 在一定的实验范围内不能区别隐变量理论和量子力学, 必须寻找实验的敏感区域 (例如图 1.35 中的几何), 也需要比较好的分析探测设备。

<sup>①</sup> 这类不等式此后被称为“CHSH(Clauser-Horne-Shimony-Holt)不等式”。

初期实验曾考虑过角动量为 0 的正电子湮没产生的两个光子的自旋关联。但对能量如此大的光子(0.51Mev),找不到有效的偏振分析器,因此只能通过间接测量,即测量光子产生的康普顿效应(Compton effect)截面来测得光子自旋状态。因为其中一项与偏振有关,实验结果最初不一致,后来逐步趋向一致:贝尔不等式不能被满足,这类结果因利用间接推断而有争议。

有明确说服力的实验是利用原子级联辐射跃迁,选择光子总角动量为 0 的情况,且光子能量较小,偏振分析效率高。这类工作始于 1969 年 Clauser 等人的实验<sup>[39]</sup>,随后也有其他研究者做了类似实验。图 1.37 给出了实验装置的示意图,源发出两个光子  $\gamma_1, \gamma_2$ ,两个偏振分析器置于偏振方向  $\hat{a}$  和  $\hat{b}$ 。测量  $\hat{a}$  与  $\hat{b}$  夹角为  $\theta$  时两个探测器的符合计数率,它代表两个光子的角动量关联。对此,隐变量理论和量子力学给出了不同的结果。选择原子级联跃迁

$$J = 0 \xrightarrow{\gamma_1} J = 1 \xrightarrow{\gamma_2} J = 0$$

式中, $J$  为原子能级角动量。由于始末态角动量相同,两个光子的角动量总和为 0。令  $R(\theta)$  代表两个偏振分析器  $\hat{a}$  与  $\hat{b}$  夹角为  $\theta$  时两个探测器的符合计数率。



图 1.37 光子自旋关联实验装置示意图

Clauser, Shimony 等人给出在理想情况下隐变量理论的结果是<sup>[39]</sup>

$$\left| \frac{R(\pi/8)}{R_0} - \frac{R(3\pi/8)}{R_0} \right|_{\text{HVT}} \leq \frac{1}{4}$$

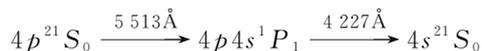
此处 HVT 是隐变量理论的缩写(hidden virable theory), $R_0$  为无偏振器时的符合计数率。量子力学结果是

$$\left| \frac{R(\pi/8)}{R_0} - \frac{R(3\pi/8)}{R_0} \right|_{\psi} = \frac{1}{4} \sqrt{2}$$

不满足贝尔不等式。

令  $R \equiv \frac{R(\pi/8)}{R_0} - \frac{R(3\pi/8)}{R_0}$ , 实测的结果如下:

(1) Freeman 和 Clauser 在 1972 年<sup>[40]</sup>采用 Ca 级联辐射



测得  $R = 0.300 \pm 0.008$ , 破坏了贝尔不等式。

(2) Holt 和 Pipkin 在 1973 年<sup>[41]</sup>采用<sup>198</sup>Hg 级联辐射

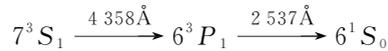


这是  $J = 1 \rightarrow J = 1 \rightarrow J = 0$  级联,量子力学公式需做改变<sup>[35]</sup>,结果是  $R = 0.216 \pm 0.013$ ,与贝尔不等式相容。但批评者认为他们使用的装有电子枪和汞蒸气的硬玻璃器壁应力带来了系统误差,使他们的结果不能重复。

(3) Clauser 在 1976 年<sup>[42]</sup>重复进行了 Holt 和 Pipkin 实验,结果是  $R = 0.2885 \pm 0.0093$ ,

破坏贝尔不等式。

(4) Fry 和 Thompson 1976 年<sup>[43]</sup>采用<sup>200</sup>Hg 级联辐射



结果是  $R = 0.296 \pm 0.014$ , 贝尔不等式被破坏。

Clauser 和 Shimony 的评述文章<sup>[37]</sup>介绍了 1978 年以前的许多实验。结果已经相当有说服力地证实贝尔不等式被破坏。以上讨论的光子自旋关联是采用“单通道”偏振分析器进行的, 即平等偏振记录为 1, 垂直偏振不记录。对此有的批评认为是“不完全测量”, 有一定的争议。

20 世纪 80 年代的实验逐步改善, 结果更加有说服力, 甚至接近了理想情况。1981 年 Aspect<sup>[44]</sup>仍然选择 Ca 的级联辐射(图 1.38), 用双光子激发(Kr 离子激光器和可调染料激光器)将 Ca 原子激发到 $1S_0$ 。Ca 原子退激发出两个光子, 角动量和为 0。测量它们的自旋关联  $R(\theta)/R_0$ 。由于采用激光激发, 光源尺寸很小( $0.5\text{mm} \times 0.05\text{mm} \times 0.05\text{mm}$ ), 对探测道几何极为有利。加上其他控制条件, 在几小时实验时间内漂移、涨落都小于 1%。单通道分析结果示于图 1.39。图中的量子力学结果已考虑了分析器立体角和探测效率, 可见实验与量子力学符合极好。贝尔不等式被破坏, 与实验值相差 9 倍标准偏差。Aspect 的研究组还进行了双通道分析器实验, 装置如图 1.40(a)所示。分析器采用了偏振块, 平行偏振光子得以直接通过, 而垂直偏振光子则被反射偏转  $90^\circ$ , 两种偏振的光子都可以通过光电倍增管(PM)被记录。通过符合线路可以得到  $N_{++}(\hat{a}, \hat{b}), N_{--}(\hat{a}, \hat{b}), N_{+-}(\hat{a}, \hat{b}), N_{-+}(\hat{a}, \hat{b})$ , 此处  $N_{+-}(\hat{a}, \hat{b})$  代表一个光子平行于  $\hat{a}$  (以 + 表示), 另一个光子垂直于  $\hat{b}$  (以 - 表示), 其余以此类推。用这些量可以计算出

$$E(\hat{a}, \hat{b}) = \frac{N_{++}(\hat{a}, \hat{b}) + N_{--}(\hat{a}, \hat{b}) - N_{+-}(\hat{a}, \hat{b}) - N_{-+}(\hat{a}, \hat{b})}{N_{++}(\hat{a}, \hat{b}) + N_{--}(\hat{a}, \hat{b}) + N_{+-}(\hat{a}, \hat{b}) + N_{-+}(\hat{a}, \hat{b})} \quad (1.8.1)$$

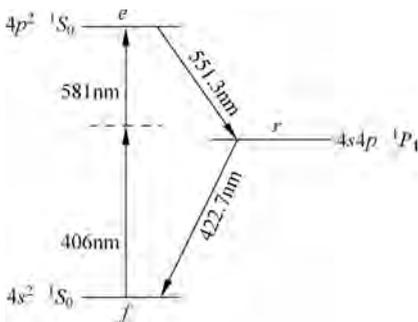


图 1.38 Ca 原子级联辐射

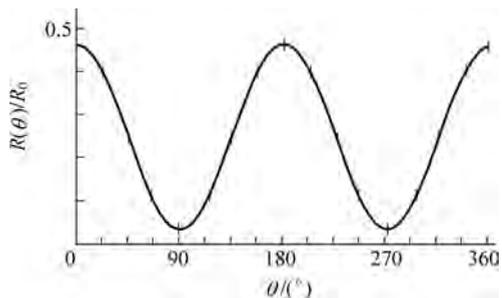


图 1.39 单通道分析器实验结果

实验结果示于图 1.40(b),  $E(\theta)$  代表  $\hat{a}$  与  $\hat{b}$  夹角为  $\theta$  时的  $E(\hat{a}, \hat{b})$  值, 可见实验装置很接近理想情况: 当  $\theta = 0$  时  $E(0)$  很接近于 1。令

$$S = E(\hat{a}, \hat{b}) - E(\hat{a}, \hat{b}') + E(\hat{a}', \hat{b}) + E(\hat{a}', \hat{b}') \quad (1.8.2)$$

对如图 1.41 的安排, 理想情况下的量子力学结果是

$$S_{QM} = 2\sqrt{2} \quad (1.8.3)$$

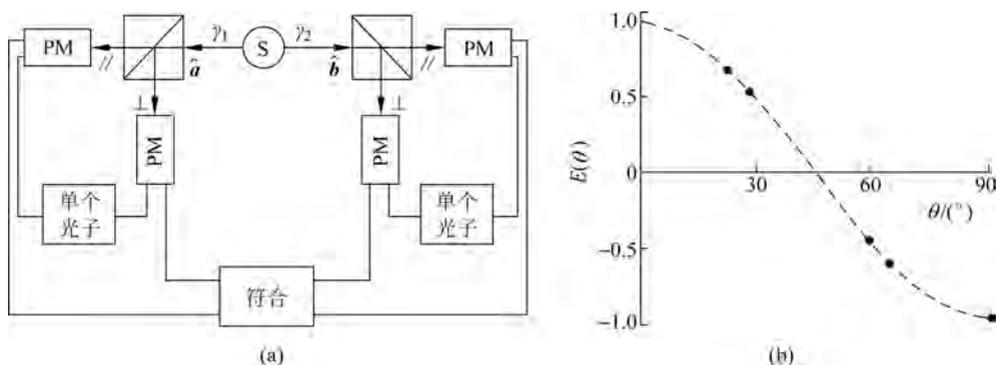


图 1.40 双通道分析实验  
(a) 实验装置; (b) 实验结果

而隐变量理论的结果是

$$-2 \leq S_{HVT} \leq 2 \quad (1.8.4)$$

实验结果是  $2.697 \pm 0.015$ 。对于现实情况(考虑分析器立体角和探测器效率),量子力学的结果是  $S_{QM} = 2.70 \pm 0.05$ 。实验结果与量子力学符合得极好,而破坏贝尔不等式达 40 倍标准偏差。

关于隐变量理论能否正确描述物理世界一直存在争论。这个问题的另一方面就是量子力学的描述是否完备。贝尔定理提出后,实验研究和理论工作大量涌现,争论更加激烈。一个实验结果发表,往往伴随着认为实验有漏洞的声音。这些批评反而导致证明“漏洞不存在”的新实验产生,或是具有构思更巧妙的实验方法和性能更卓越的探测手段的不断产生。

光子在非线性晶体中的下转换提供了讨论 EPR 佯谬的实例。共轭光子能量之和等于泵浦光子,即  $k_1 + k_2 = \text{const}$ 。这两个光子发射时间相同,即  $t_1 - t_2 = 0$ 。而这相当于  $p_1 + p_2 = \text{const}, x_1 - x_2 = 0$ ,是爱因斯坦等三人在 1935 年提出的问题。在 1.5.3 节中讨论的高可见度干涉仪正是为了验证贝尔不等式建造的。乔瑞宇将定域隐变量理论用于这个实验的情况。由于  $\Delta L$  远大于单光子相干长度,故分别在两个干涉仪内都没有单光子干涉。根据隐变量理论,双光子干涉的可见度最多是 50%,实测的结果是  $80.4\% \pm 0.6\%$ ,使贝尔不等式破坏达 16 个标准偏差。

在这个实验基础上,乔瑞宇研究组提出了“无漏洞贝尔不等式实验”的建议<sup>[45]</sup>。方法包括使用两块非线性晶体,实现起来比较复杂。P. G. Kwiat 等人<sup>[46]</sup>提供了更简单的方法。他们使用非线性(beta barium borate, BBO)晶体,使用“非共线第二型相位匹配”,直接产生偏振纠缠态。在这类相位匹配中,下转换光子位于两个锥面上,一个是寻常偏振,另一个是非常偏振。将泵浦光方向与晶体轴间的角度调整合适,两个锥面就会重叠(图 1.42)。这样两个锥体相交线的两个方向各在泵浦光方向的一侧。沿着这两个方向(下标 1,2)出射的下转换光子正好是偏振纠缠态:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H_1V_2\rangle + e^{i\alpha} |V_1H_2\rangle) \quad (1.8.5)$$

此处  $H$  和  $V$  分别代表水平(非常)和垂直(寻常)偏振。相对相角  $\alpha$  来自晶体双折射。用附

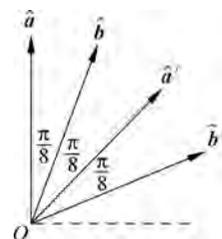


图 1.41  $\hat{a}, \hat{b}, \hat{a}', \hat{b}'$  选择

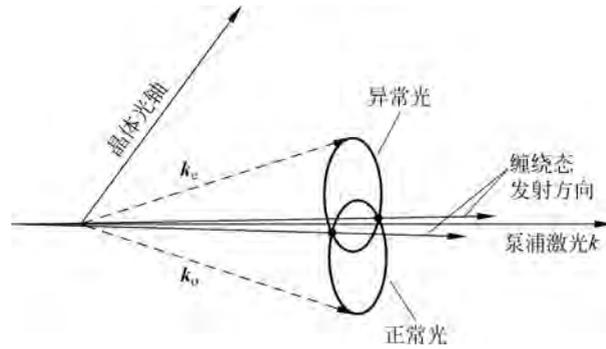


图 1.42 第二型相位匹配下转换偏振纠缠光子

加的双折射移相器可以将  $\alpha$  调整为 0 或  $\pi$ 。通过在任何一路放置半波片可将  $H$  偏振和  $V$  偏振互换。因此就能产生以下 4 种 EPR-Bell 态的任一种：

$$\left. \begin{aligned} |\psi^\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H_1V_2\rangle \pm |V_1H_2\rangle) \\ |\varphi^\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|H_1H_2\rangle \pm |V_1V_2\rangle) \end{aligned} \right\} \quad (1.8.6)$$

例如从  $|\psi^\pm\rangle$  出发, 在第二束内放置半波片就可以得到  $|\varphi^\pm\rangle$ 。由于光在晶体内有双折射, 两束光的群速不同, 会产生时间延迟和路径(水平、垂直方向)偏离, 必须将它们限制在相干时间和相干长度内才能观察到干涉。实验装置示于图 1.43。在装置中用半波片  $H_0$  将  $H$  与  $V$  偏振互换, 再通过相同的双折射晶体  $C_1$  与  $C_2$  可将时间延迟和空间偏离纠正。适当设定半波片  $H_1$  和  $1/4$  波片  $Q$ , 可获得任一种贝尔纠缠态(式(1.8.6))。  $P_1$  和  $P_2$  为检偏器,  $D_1$  和  $D_2$  是硅雪崩光电二极管。研究组获得的最大可见度是  $97.8\% \pm 1.0\%$ 。

用这个纠缠态检验贝尔不等式, 理论与式(1.8.1), 式(1.8.2)和式(1.8.4)相同。令  $C(\theta_1, \theta_2)$  代表检偏器读数为  $\theta_1$  和  $\theta_2$  时的符合计数率, 定义

$$E(\theta_1, \theta_2) = \frac{C(\theta_1, \theta_2) + C(\theta_1^\perp, \theta_2^\perp) - C(\theta_1, \theta_2^\perp) - C(\theta_1^\perp, \theta_2)}{C(\theta_1, \theta_2) + C(\theta_1^\perp, \theta_2^\perp) + C(\theta_1, \theta_2^\perp) + C(\theta_1^\perp, \theta_2)} \quad (1.8.7)$$

此处

$$\theta_1^\perp = \frac{\pi}{2} + \theta_1, \quad \theta_2^\perp = \frac{\pi}{2} + \theta_2$$

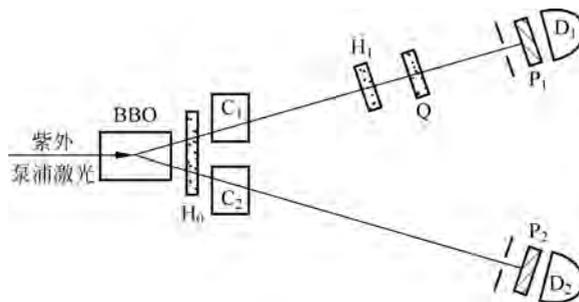


图 1.43 用下转换产生偏振纠缠态的装置示意图

观察到的关联用参数  $S$  表示：

$$S = E(\theta_1, \theta_2) + E(\theta'_1, \theta_2) + E(\theta_1, \theta'_2) - E(\theta'_1, \theta'_2) \quad (1.8.8)$$

定域实在性理论给出  $|S| \leq 2$ 。

实验设定  $\theta_1 = -22.5^\circ, \theta'_1 = 22.5^\circ, \theta_2 = -45^\circ, \theta'_2 = 0^\circ$ 。观察到的数据列于表 1.1。

表 1.1 不同贝尔态测得的关联参数

EPR-Bell 态	$C(\theta_1, \theta_2)$	$S$
$ \psi^+\rangle$	$\sin^2(\theta_1 + \theta_2)$	$-2.6489 \pm 0.0064$
$ \psi^-\rangle$	$\sin^2(\theta_1 - \theta_2)$	$-2.6900 \pm 0.0066$
$ \varphi^+\rangle$	$\cos^2(\theta_1 - \theta_2)$	$2.570 \pm 0.014$
$ \varphi^-\rangle$	$\cos^2(\theta_1 + \theta_2)$	$2.529 \pm 0.013$

由于纠缠态是从晶体直接产生的,比过去实验报道的强度大一个量级。5min 产生的数据所得的  $S$  参数突破隐变量理论上限达 100 个标准偏差。这在“无漏洞实验”方向上迈进了一大步。

## 1.9 惠勒的推迟选择实验

在 EPR 佯谬的有关讨论中,涉及是否存在超距作用的问题。对一个粒子测  $S_x$ , 根据结果就能对远方另一粒子的  $S_x$  做出确切预言。如果做另一种安排,测粒子的  $S_y$ , 则视结果就立即能对远方粒子的  $S_y$  做出预言。为什么对一个粒子的测量选择能影响远处另一粒子性质的预测呢? 隐变量理论用不存在超距作用否定了量子力学的关联,并企图用定域理论取系综平均得出关联的结果。从贝尔不等式被破坏看出,这个企图是失败的。但能否用实验直接来判断对粒子的测量,或实验安排能否发出什么信息呢? 1978 年,惠勒(J. A. Wheeler)<sup>[47]</sup> 提出了问题: 如果关于测量光子路径或干涉条纹的选择是在光子通过狭缝之后突然决定的,实验结果是否和早做安排时一致? 如果实验安排给光子传递了信息,它就可以早做反应: 是以波还是粒子的面貌出现。但若在它已通过狭缝后临时做出选择,即使光子收到信息也来不及改变了! 因此,如果惠勒问题的答案是“一致”,就不是什么传递信号的问题。考虑如图 1.44 的安排,单个光子通过分束器  $BS_1$  进入干涉仪。如果没有分束器  $BS_2$ ,探测器  $D_1$  和  $D_2$  就能判别光子走的“哪一条路径”,因而没有干涉。但如果在光子已进入干涉仪、即将到达  $BS_2$  处的最后一刻装上  $BS_2$ ,仍然能得到干涉的结果,即和最初装有  $BS_2$  结果一致,就说明没有什么传递信息问题。1987 年有两个组做了推迟选择实验。其中一组 Hellmuth, Walter, Zajonc, Schleich<sup>[48]</sup> 的实验安排即如图 1.44 所示。图 1.45 表示两束在透射和反射过程中的相位变化情况,  $\phi$  代表两束到达  $BS_2$  时的相位差。从  $M_2$  到  $BS_2$  束在反射时有相移  $\pi$ , 因为反射是从光疏到光密的<sup>①</sup>。从图 1.45 标明的进入探测器  $D_1$  和  $D_2$  的相干束相位可以判断在不同相位差  $\phi$  情况下两个探测器的计数率,列于表 1.2。对任何确定的  $\phi$ ,  $N_1 + N_2 = N$  (总计数率)。

① 分束器是未镀膜。从光疏到光密介质分界处的反射束有半波损失,即有相差  $\pi$ 。

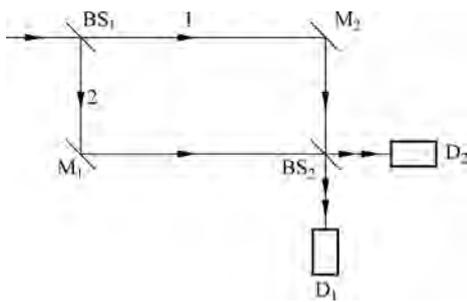


图 1.44 光子干涉实验装置

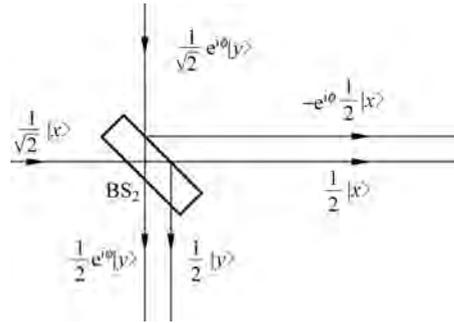


图 1.45 光束在分束器处组成相干束的相位关系

表 1.2 不同相位差下两个探测器的计数率

相位差	D <sub>1</sub> 计数率 N <sub>1</sub> /s	D <sub>2</sub> 计数率 N <sub>2</sub> /s
0	N	0
$\pi/2$	N/2	N/2
$\pi$	0	N

推迟选择实验的关键部件是泡克尔斯盒(Pockels cell, PC)。它可以在几纳秒(ns)时间中被激活或退激。在激活时它能使光偏振面旋转,在它后面放上偏振块,就能把偏振面旋转的光束反射偏转。图 1.46 表示在图 1.44 的 BS<sub>1</sub> 和 M<sub>2</sub> 之间放上泡克尔斯盒(PC)和偏振块(POL)。如果 PC 被激活,则从 BS<sub>1</sub> 过来的光子就经反射进入探测器 D<sub>3</sub>。如果 PC 不被激活,光子就到达 M<sub>2</sub>。这种安排所做的选择是: PC 被激活——测光子路径(表现粒子性),PC 不被激活——不测光子路径(表现波动性)。

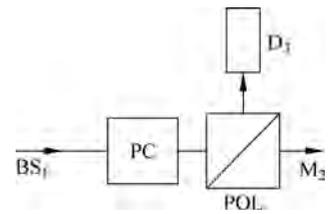


图 1.46 推迟选择模式安排原理图

实验中采用皮秒(ps)Kr 离子激光器,脉冲宽度为 150ps,采取措施使两个脉冲之间的间隔足够大,并使用光学衰减器使每个脉冲的平均光子数为 0.2,入射束经 BS<sub>1</sub> 分为两束后进入两条单模光纤。干涉由光电倍增管 D<sub>1</sub> 和 D<sub>2</sub> 探测。如果 PC 不被激活,则 N<sub>1</sub> 和 N<sub>2</sub> 随  $\phi$  的变化就如表 1.2 所示,表示出干涉图像。如果 PC 被激活,则 N<sub>3</sub>=N/2, N<sub>1</sub>=N<sub>2</sub>=N/4,与  $\phi$  无关,即没有干涉发生。推迟选择实验的做法是:不激活 PC,所测计数表现干涉,这种安排称为“正常模式”。激活 PC,但在光脉冲已通过分束器 BS<sub>1</sub> 后突然退激 PC,这种操作称为“推迟选择模式”。根据量子力学理论,两种模式应该得到相同的结果。在实验中激光脉冲交替进入正常模式或延迟选择模式。两种模式分别用点(•)和加号(+)表示于图 1.47 中。图 1.47(a)和图 1.47(b)分别是探测器 D<sub>1</sub> 和 D<sub>2</sub> 的 30s 计数。计数存入多道分析器,横坐标相当于时间,每一道相当于 0.25s。时间轴是由光纤因温度引起的折射系数变化决定的。从图中可以看出,两种模式给出的干涉图样相同。将两个探测器中两种模式计数之比随时间的变化画于图 1.48 中,得到

$$\frac{\text{正常模式计数}}{\text{推迟选择模式计数}} = \begin{cases} 1.00 \pm 0.02, & \text{探测器 } D_1 \\ 0.99 \pm 0.02, & \text{探测器 } D_2 \end{cases}$$

这和量子力学的结论是完全一致的。

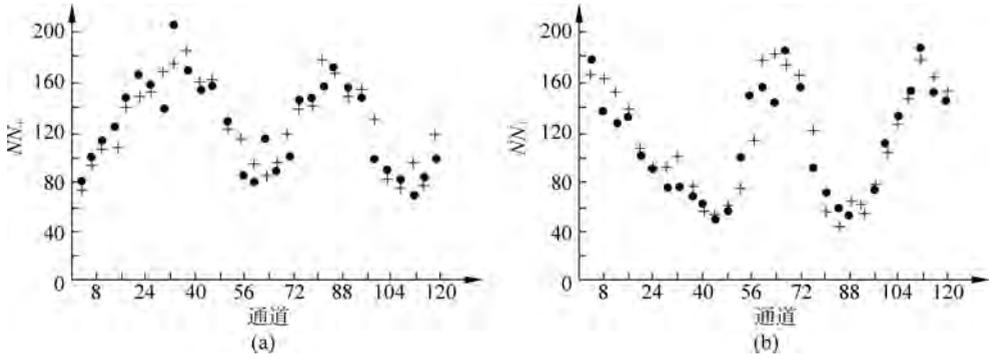


图 1.47 两种模式的干涉图样相同

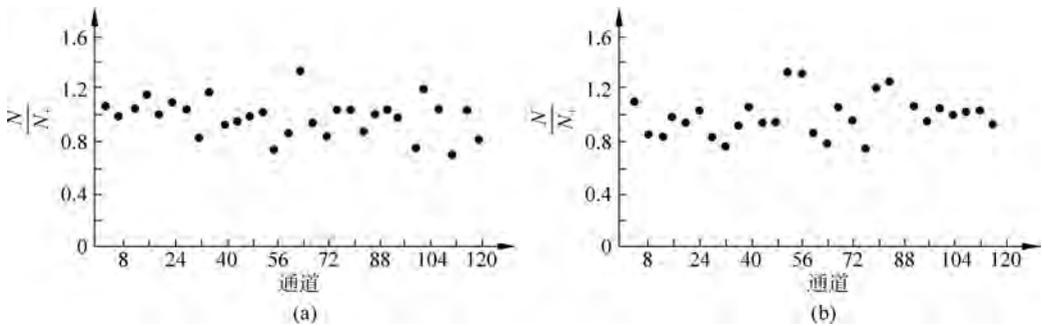
(a) 探测器  $D_1$  的 30s 计数; (b) 探测器  $D_2$  的 30s 计数

图 1.48 两种模式的计数比

(a) 探测器  $D_1$  的计数比; (b) 探测器  $D_2$  的计数比

隐变量理论和有关光的二象性延迟选择问题,都是涉及量子力学如何描述微观物理世界的根本问题。现在量子力学的描述是否带有什么根本性的问题呢?费曼的一段话<sup>[49]</sup>深刻地反映出实际情况:“在了解量子力学代表的世界观方面,我们一向有很多困难……你们知道从来每个新的想法总要经过一代或两代人才可能明显看出它不再有真正的问题。我不能表述出(量子力学的)真正的问题,因此我猜想没有真正的问题,但我并不肯定就没有真正的问题了。”

## 1.10 不涉及不等式的贝尔定理

### 1.10.1 三粒子完全关联

贝尔定理的证明从爱因斯坦等三人否定量子力学关联的“定域性”出发,导致它和量子力学的矛盾。对于二粒子关联,如果对一个粒子的测量结果可以给出第二个粒子某个性质的确切判断,则称这种关联为“完全关联”。如果仅能对第二个粒子的某种性质给出概率分布的判断,则称为“统计关联”。在 1.7.3 节讨论的玻姆版本的 EPR 佯谬,是通过第一个粒子测  $\hat{a}$  方向的自旋分量做出对第二粒子自旋  $\hat{b}$  分量的判断。如果  $\hat{a} = \hat{b}$  就是完全关联的,那么  $\hat{a} \neq \hat{b}$  就是统计关联的。贝尔定理用  $\hat{a} \neq \hat{b}$  导出了不等式。对二粒子系统在  $\hat{a} = \hat{b}$

的完全关联下,EPR 佯谬的矛盾暴露不出来。D. M. Greenberger 等人提出<sup>[50-51]</sup>,对于 3 个或更多的自旋 1/2 粒子系统在完全关联的情况下,可以证明定域性和实在性的原则是和量子力学不相容的。这样就用不等式而证明了贝尔定理。N. D. Mermin<sup>[52-53]</sup>也有类似的考虑,下面描述的也是一个想象中的实验,但是有可能在实验室中实现。一个动量为 0 的粒子衰变为 3 个质量相同的粒子。如果 3 个粒子能量相同(可以在探测器前放上能量滤波器保证只记录能量相同的粒子),则它们的动量方向间成 120°(图 1.49)。在粒子源周围开 6 个孔,衰变粒子或是通过  $a, b, c$ ,或是通过  $a', b', c'$  射出。在孔外,三粒子体系的波函数是

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|a\rangle_1 |b\rangle_2 |c\rangle_3 + |a'\rangle_1 |b'\rangle_2 |c'\rangle_3) \quad (1.10.1)$$

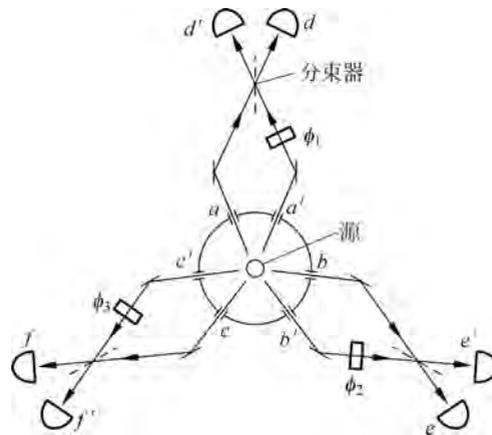


图 1.49 三粒子干涉仪示意图

此处  $|a\rangle_1$  代表束  $a$  中的第一个粒子,以此类推。束  $a$  和束  $a'$  经反射后会聚于分束器。从分束器射出的两束进入探测器  $d$  和  $d'$ 。在  $a'$  束途中有一个可调的移相器产生相移  $\phi_1$ 。因此  $|a\rangle_1$  和  $|a'\rangle_1$  的演化分别是

$$|a\rangle_1 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|d\rangle_1 + i |d'\rangle_1) \quad (1.10.2)$$

$$|a'\rangle_1 \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\phi_1}(|d'\rangle_1 + i |d\rangle_1) \quad (1.10.3)$$

反射束在分束器处有  $\pi/2$  相移。粒子 2 和粒子 3 的演化与此类似。3 个粒子的状态演化使缠绕态式(1.10.1)变为以下的线性组合:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle \rightarrow \frac{1}{4} & [(1 - ie^{i(\phi_1+\phi_2+\phi_3)}) |d\rangle_1 |e\rangle_2 |f\rangle_3 + (i - e^{i(\phi_1+\phi_2+\phi_3)}) |d\rangle_1 |e\rangle_2 |f'\rangle_3 + \\ & (i - e^{i(\phi_1+\phi_2+\phi_3)}) |d\rangle_1 |e'\rangle_2 |f\rangle_3 + (i - e^{i(\phi_1+\phi_2+\phi_3)}) |d'\rangle_1 |e\rangle_2 |f\rangle_3 + \\ & (-1 + ie^{i(\phi_1+\phi_2+\phi_3)}) |d\rangle_1 |e'\rangle_2 |f'\rangle_3 + (-1 + ie^{i(\phi_1+\phi_2+\phi_3)}) |d'\rangle_1 |e\rangle_2 |f'\rangle_3 + \\ & (-1 + ie^{i(\phi_1+\phi_2+\phi_3)}) |d'\rangle_1 |e'\rangle_2 |f\rangle_3 + (-i + e^{i(\phi_1+\phi_2+\phi_3)}) |d'\rangle_1 |e'\rangle_2 |f'\rangle_3] \end{aligned} \quad (1.10.4)$$

第一项 3 个探测器  $d, e, f$  接收从  $a, b, c$  来的透射束(括号中的第一项是 1), 也接收从  $a', b', c'$  来的(经移相)反射束(括号中的第二项  $i^3 = -i$ )。和第一项相比, 第二、三、四项包含一个带撇的探测器, 有一个透射束和一个反射束对调。因此括号中的第一项变为  $i$ , 第二项的系数是  $i^2 = -1$ 。第五、六、七项包含两个带撇的探测器, 括号中的第一项是  $i^2 = -1$ , 第二项的系数是  $i$ 。最后一项是三个带撇的探测器, 括号中的第一项是  $i^3 = -i$ , 第二项的系数是 1。假设探测器是完全的, 因此每组 3 个衰变粒子会使  $d$  或  $d'$  的任意一个,  $e$  或  $e'$  的任意一个,  $f$  或  $f'$  的任意一个记录粒子。从式(1.10.4)可得探测概率为

$$P_{def}(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = \frac{1}{8}[1 + \sin(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3)] \quad (1.10.5)$$

$$P_{d'ef}(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = \frac{1}{8}[1 - \sin(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3)] \quad (1.10.6)$$

如果带撇的探测器为偶(奇)数, 则方括号中的第二项符号为正(负)。如果令粒子进入不带撇的探测器记 +1, 进入带撇的探测器记 -1, 则测量的期望值是

$$\begin{aligned} E(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3) &= P_{def}(\phi_1, \phi_2, \phi_3) + P_{d'e'f'}(\phi_1, \phi_2, \phi_3) + \\ &P_{d'ef'}(\phi_1, \phi_2, \phi_3) + P_{de'f}(\phi_1, \phi_2, \phi_3) - \\ &P_{d'ef}(\phi_1, \phi_2, \phi_3) - P_{de'f'}(\phi_1, \phi_2, \phi_3) - \\ &P_{def'}(\phi_1, \phi_2, \phi_3) - P_{d'e'f}(\phi_1, \phi_2, \phi_3) \\ &= \sin(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3) \end{aligned} \quad (1.10.7)$$

如果选择

$$\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 = \pi/2$$

则有

$$E(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = 1 \quad (1.10.8)$$

如果选择

$$\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 = 3\pi/2$$

则有

$$E(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = -1 \quad (1.10.9)$$

这两种情况都属完全关联。下面就可以演示 EPR 佯谬的前提彼此矛盾。由于定域性, 对 3 个粒子分别测量, 彼此完全独立。设在态  $\lambda$  对粒子 1(移相  $\phi_1$ ) 做测量, 所得结果为  $A_\lambda(\phi_1)$ , 有记录为 +1, 无记录为 -1。类似地, 对粒子 2 和粒子 3 做测量, 分别得  $B_\lambda(\phi_2), C_\lambda(\phi_3)$ 。对式(1.10.8)的情况, 有

$$\begin{aligned} A_\lambda(\phi_1)B_\lambda(\phi_2)C_\lambda(\phi_3) &= 1, \\ \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 &= \pi/2 \end{aligned} \quad (1.10.10a)$$

对式(1.10.9)的情况, 有

$$\begin{aligned} A_\lambda(\phi_1)B_\lambda(\phi_2)C_\lambda(\phi_3) &= -1, \\ \phi_1 + \phi_2 + \phi_3 &= 3\pi/2 \end{aligned} \quad (1.10.10b)$$

从式(1.10.10a)可得

$$A_\lambda(0)B_\lambda(0)C_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1 \quad (1.10.11a)$$

$$A_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)B_\lambda(0)C_\lambda(0) = 1 \quad (1.10.11b)$$

$$A_\lambda(0)B_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)C_\lambda(0) = 1 \quad (1.10.11c)$$

由于这些数都是+1或-1,任何数都是自己的倒数。从式(1.10.11a)和式(1.10.11b)可得

$$A_\lambda(0)C_\lambda(0)A_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)C_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1 \quad (1.10.11d)$$

从式(1.10.11c)得

$$A_\lambda(0)C_\lambda(0) = \frac{1}{B_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)} = B_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right) \quad (1.10.11e)$$

式(1.10.11d)和式(1.10.11e)给出

$$A_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)B_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right)C_\lambda\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1 \quad (1.10.11f)$$

式(1.10.11f)是属于 $\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 = 3\pi/2$ 范畴的,因此和式(1.10.10b)矛盾,即量子力学结果式(1.10.7)是不能被“定域实在性”理论重现的。图 1.49 所示的装置之所以被称为“三粒子干涉仪”,是因为当固定两路相移而变更第三路相移时符合计数率(式(1.10.5)或式(1.10.6))呈正弦式的振荡:极小值为 0,极大值是粒子从小孔中发射率的 1/4。其产生的图像可以称为“三粒子的干涉条纹”。如果只测任意两个探测器(例如  $e$  和  $f$ )的符合计数率,则从式(1.10.5)和式(1.10.6)可得

$$P_{ef}(\phi_1, \phi_2) = P_{def}(\phi_1, \phi_2, \phi_3) + P_{d'ef}(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = \frac{1}{4}$$

即三粒子干涉仪不给出二粒子干涉图像。类似地,将  $P_{def}, P_{d'ef}, P_{de'f}, P_{d'e'f}$  相加得到  $P_f = \frac{1}{2}$ ,也和  $\phi$  无关,即不给出单粒子干涉图像。

虽然三粒子干涉仪在实现时会有困难,但是二粒子体系也可用于不经不等式直接验证贝尔定理的情况,这是理论工作的进展。

### 1.10.2 不涉及不等式的贝尔定理:二粒子情况

以下是 L. Hardy<sup>[54-55]</sup>给出的证明。有两个粒子  $i=1,2$ 。选择正交归一基  $|\pm\rangle_i$ ,组成缠绕态

$$|\Psi\rangle = \alpha |+\rangle_1 |+\rangle_2 - \beta |-\rangle_1 |-\rangle_2 \quad (1.10.12)$$

此处  $\alpha$  和  $\beta$  是实数,并满足

$$\alpha^2 + \beta^2 = 1 \quad (1.10.13)$$

引入另一组基  $|u_i\rangle, |v_i\rangle$ :

$$|+\rangle_i = b |u_i\rangle + ia^* |v_i\rangle \quad (1.10.14a)$$

$$|-\rangle_i = ia |u_i\rangle + b^* |v_i\rangle \quad (1.10.14b)$$

此处

$$|a|^2 + |b|^2 = 1 \quad (1.10.15)$$

原有基的正交性保证新基的正交性。式(1.10.14)的逆变换是

$$|u_i\rangle = b^* |+\rangle_i - ia^* |-\rangle_i \quad (1.10.16a)$$

$$|v_i\rangle = -ia |+\rangle_i + b |-\rangle_i \quad (1.10.16b)$$

用新基表示的  $|\Psi\rangle$  是

$$|\Psi\rangle = (\alpha b^2 + \beta a^2) |u_1\rangle |u_2\rangle + i(\alpha a^* b - \beta ab^*) |u_1\rangle |v_2\rangle + \\ i(\alpha a^* b - \beta ab^*) |v_1\rangle |u_2\rangle - (\alpha a^{*2} + \beta b^{*2}) |v_1\rangle |v_2\rangle \quad (1.10.17)$$

要求 $|u_1\rangle|u_2\rangle$ 的系数为 $0^{\text{①}}$ ,即

$$\frac{a^2}{\alpha} = -\frac{b^2}{\beta} \equiv k^2$$

或

$$a = k\sqrt{\alpha}, \quad b = ik\sqrt{\beta} \quad (1.10.18)$$

此处取了正平方根。常数 $k$ 可以通过适当选定 $a$ 和 $b$ 的相角为实数确定。式(1.10.15)和式(1.10.18)给出

$$k^2 = \frac{1}{|\alpha| + |\beta|} \quad (1.10.19)$$

将式(1.10.18)代回式(1.10.17),并用式(1.10.19)得到

$$|\Psi\rangle = - \left[ -\frac{\alpha\beta}{|\alpha| - |\beta|} |u_1\rangle |u_2\rangle + \sqrt{\alpha\beta} |u_1\rangle |v_2\rangle + \sqrt{\alpha\beta} |v_1\rangle |u_2\rangle + (|\alpha| - |\beta|) |v_1\rangle |v_2\rangle \right] \\ = \left[ \frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\sqrt{|\alpha| - |\beta|}} |u_1\rangle + \sqrt{|\alpha| - |\beta|} |v_1\rangle \right] \left[ \frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\sqrt{|\alpha| - |\beta|}} |u_2\rangle + \sqrt{|\alpha| - |\beta|} |v_2\rangle \right] \quad (1.10.20)$$

再换第三组基 $|c_i\rangle, |d_i\rangle$ :

$$|c_i\rangle = A |u_i\rangle + B |v_i\rangle \quad (1.10.21a)$$

$$|d_i\rangle = -B^* |u_i\rangle + A^* |v_i\rangle \quad (1.10.21b)$$

它的逆变换是

$$|u_i\rangle = A^* |c_i\rangle - B |d_i\rangle \quad (1.10.22a)$$

$$|v_i\rangle = B^* |c_i\rangle + A |d_i\rangle \quad (1.10.22b)$$

上两式中的 $A$ 与 $B$ 分别是

$$A = \frac{\sqrt{\alpha\beta}}{\sqrt{1 - |\alpha\beta|}}, \quad B = \frac{|\alpha| - |\beta|}{\sqrt{1 - |\alpha\beta|}} \quad (1.10.23)$$

从 $\alpha, \beta$ 的归一化条件(式(1.10.13))得到 $A$ 和 $B$ 的归一化条件:

$$|A|^2 + |B|^2 = 1 \quad (1.10.24)$$

用基 $|c_i\rangle$ 和 $|u_i\rangle$ 可以将 $|\Psi\rangle$ 表示为

$$|\Psi\rangle = N(|c_1\rangle |c_2\rangle - A^2 |u_1\rangle |u_2\rangle) \quad (1.10.25)$$

此处

$$N = \frac{1 - |\alpha\beta|}{|\alpha| - |\beta|}$$

从式(1.10.25)出发,可以将 $|\Psi\rangle$ 用不同的基表示为4种等价形式:

(1) 用 $u_1, v_1; u_2, v_2$ (这是原有的形式):

$$|\Psi\rangle = N(AB |u_1\rangle |v_2\rangle + AB |v_1\rangle |u_2\rangle + B^2 |v_1\rangle |v_2\rangle) \quad (1.10.26a)$$

① 这是关键的一步,其作用是导出下文的式(1.10.28a)。

(2) 用  $c_1, d_1; u_2, v_2$  (用式(1.10.21a)置换  $|c_2\rangle$ , 用式(1.10.22a)置换  $|u_1\rangle$ ):

$$|\Psi\rangle = N[|c_1\rangle(A|u_2\rangle + B|v_2\rangle) - A^2(A^*|c_1\rangle - B|d_1\rangle)|u_2\rangle] \quad (1.10.26b)$$

(3) 用  $u_1, v_1; c_2, d_2$  (用式(1.10.21a)置换  $|c_1\rangle$ , 用式(1.10.22a)置换  $|u_2\rangle$ ):

$$|\Psi\rangle = N[(A|u_1\rangle + B|v_1\rangle)|c_2\rangle - A^2|u_1\rangle(A^*|c_2\rangle - B|d_2\rangle)] \quad (1.10.26c)$$

(4) 用  $c_1, d_1; c_2, d_2$  (用式(1.10.21a)置换  $|u_1\rangle|u_2\rangle$ ):

$$|\Psi\rangle = N[|c_1\rangle|c_2\rangle - A^2(A^*|c_1\rangle - B|d_1\rangle)(A^*|c_2\rangle - B|d_2\rangle)] \quad (1.10.26d)$$

定义物理可观测量  $U_i$  和  $D_i$ , 相应的算符是

$$\hat{U}_i = |u_i\rangle\langle u_i|, \quad \hat{D}_i = |d_i\rangle\langle d_i| \quad (1.10.27)$$

它们的本征值是 0 或 1。例如  $\hat{U}_i|u_i\rangle = |u_i\rangle, \hat{U}_i|v_i\rangle = 0$ 。一般情况下,  $\hat{U}_i$  和  $\hat{D}_i$  不对易, 即对任意一个粒子, 不能同时精确地测量其  $U_i$  与  $D_i$ 。从式(1.10.26a)可以看出, 如果同时测量  $U_1$  和  $U_2$ , 有

$$U_1 U_2 = 0 \quad (1.10.28a)$$

这是在式(1.10.17)中要求  $|u_1\rangle|u_2\rangle$  的系数为 0 的结果。下面要为隐变量理论设计一个陷阱  $U_1(\lambda)U_2(\lambda) = 1$ , 显然此结果与式(1.10.28a)矛盾。从式(1.10.26b)可知, 如果对粒子 1 测  $D_1$ , 对粒子 2 测  $U_2$ , 那么 (因只有  $|d_1\rangle|u_2\rangle$  项包含  $|d_1\rangle$ )

$$\text{如果 } D_1 = 1, \quad \text{则有 } U_2 = 1 \quad (1.10.28b)$$

类似地, 从式(1.10.26c)可知, 如果对粒子 1 测  $U_1$ , 对粒子 2 测  $D_2$ , 那么

$$\text{如果 } D_2 = 1, \quad \text{则有 } U_1 = 1 \quad (1.10.28c)$$

最后, 从式(1.10.26b)可知, 如果对粒子 1 测  $D_1$ , 对粒子 2 测  $D_2$ , 那么

$$\text{测得 } D_1 = 1, \quad D_2 = 1 \text{ 的概率为 } |NA^2B^2|^2 \quad (1.10.28d)$$

以上都是量子力学的预言。

下面将直接证明定域实在性理论和量子力学不相容。用隐变量  $\lambda$  描述一对粒子, 不同  $\lambda$  值的粒子对组成一个系综。待粒子彼此远离后再对它们进行测量。如果一次测量给出  $D_1 = 1, D_2 = 1$ , 这是量子力学式(1.10.28d)允许的。既然  $D_1 = 1$ , 则根据式(1.10.28b), 如果对  $U_2$  进行测量, 应得  $U_2 = 1$ 。根据定域性的观点, 这个结果应与对粒子 1 进行什么测量毫无关系, 即  $U_2(\lambda) = 1$ 。同理, 根据式(1.10.28c),  $D_2 = 1$  意味着  $U_1 = 1$ , 用定域性有  $U_1(\lambda) = 1$ 。总结起来, 如果测得  $D_1 = 1, D_2 = 1$ , 定域性预言  $U_1(\lambda)U_2(\lambda) = 1$ , 那么意为如果对这对粒子不测  $D_1$  和  $D_2$  而测  $U_1$  和  $U_2$ , 就应有  $U_1U_2 = 1$ , 这和量子力学的预言(式(1.10.28a))矛盾。实在性理论的前提要求: 既然式(1.10.28b)和式(1.10.28c)分别预言了  $U_2 = 1$  和  $U_1 = 1$  (概率为 1), 而且在测量  $D_1$  时没有干扰粒子 2, 在测量  $D_2$  时没有干扰粒子 1,  $U_1$  和  $U_2$  就有“实在的元素”, 这就导致了实在性理论与量子力学的矛盾。

以上证明取决于测得  $D_1 = 1$  和  $D_2 = 1$  的概率:

$$|NA^2B^2|^2 = \left[ \frac{(|\alpha| - |\beta|)|\alpha\beta|}{1 - |\alpha\beta|} \right]^2$$

如果  $\alpha, \beta$  其中之一为 0, 此概率为 0。意为  $|\varphi\rangle$  为乘积态, 不是缠绕态。另外,  $|\alpha| = |\beta|$ , 这

是最大缠绕态,概率也为 0。因此,Hardy 的证明表明对除最大缠绕态以外的任何二粒子缠绕态,贝尔定理成立。

T. F. Jordan<sup>[56]</sup>和 S. Goldstein<sup>[57]</sup>分别对二粒子态给出了贝尔定理的证明。

### 1.10.3 二粒子体系不涉及不等式贝尔定理的实验验证

实验的原理图示于图 1.50,该实验是由曼德尔的研究组进行的<sup>[58-59]</sup>。参量下转换(图 1.50 中 PDC)的两个光子同时从非线性晶体射出。用旋光器使两个光子偏振正交(以  $x$  和  $y$  表示)。它们从相反方向射在分束器 BS 上,并在此混合。两个混合束从方向 1 和方向 2 射出。分束器是非对称的。令  $T$  和  $T'$  分别代表方向 1 和方向 2 的透射系数, $R$  和  $R'$  分别代表向 2 和方向 1 的反射系数。由于光是接近法线入射的,这些系数可以认为与偏振无关。离开分束器的光子对量子状态是

$$|\psi\rangle = TT' |1\rangle_{1x} |1\rangle_{2y} + RR' |1\rangle_{1y} |1\rangle_{2x} + TR' |1\rangle_{1x} |1\rangle_{1y} + T'R |1\rangle_{2x} |1\rangle_{2y} \quad (1.10.29)$$

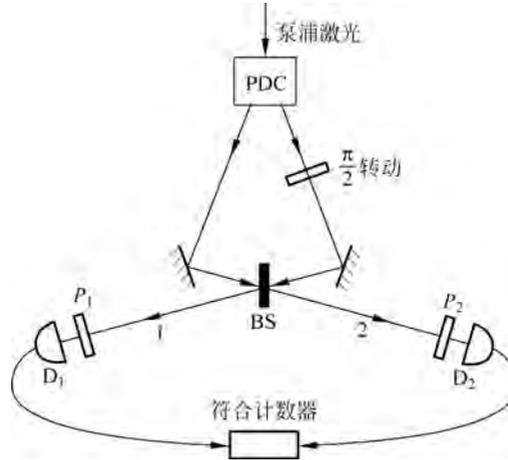


图 1.50 实验装置示意图

$|1\rangle_{2y}$  代表 1 个光子向方向 2 传播,偏振为  $y$ ,其余以此类推。上式等号右侧第三、四项对符合计数没有贡献。光子经检偏器  $P_1, P_2$  后分别进入探测器  $D_1, D_2$ 。记  $P_j(\theta)$  为探测器  $D_j(j=1,2)$  探测光子的概率, $\theta$  为检偏器设定的角度, $\bar{\theta} = \theta + \pi/2$  是和  $\theta$  正交的偏振方向。完全的检偏器和探测器保证  $P_j(\theta) + P_j(\bar{\theta}) = 1$ 。记  $P_{12}(\theta_1, \theta_2)$  为检偏器设定角度分别为  $\theta_1, \theta_2$  时两个探测器同时各记录一个光子的概率, $P_{12}(\theta_1, -)$  代表检偏器  $P_1$  设定于  $\theta_1$ 、方向 2 没有检偏器时的符合计数概率。它满足

$$P_{12}(\theta_1, -) = P_{12}(\theta_1, \theta_2) + P_{12}(\theta_1, \bar{\theta}_2) \quad (1.10.30)$$

此处  $\theta_2$  是任意的。类似地有

$$P_{12}(-, \theta_2) = P_{12}(\theta_1, \theta_2) + P_{12}(\bar{\theta}_1, \theta_2) \quad (1.10.31)$$

在给定参数  $T, T', R, R'$  的情况下,可以找到  $\theta_1, \theta_2, \theta'_1, \theta'_2$  特定的值,使以下关系成立<sup>[59]</sup>:

$$P_{12}(\theta_1, \bar{\theta}'_2) = 0 \quad (1.10.32a)$$

$$P_{12}(\bar{\theta}'_1, \theta_2) = 0 \quad (1.10.32b)$$

$$P_{12}(\theta'_1, \theta'_2) = 0 \quad (1.10.32c)$$

$$P_{12}(\theta_1, \theta_2) > 0 \quad (1.10.32d)$$

这些是量子力学的结果。从式(1.10.30)和式(1.10.32a)可以得到

$$P_{12}(\theta_1, -) = P_{12}(\theta_1, \theta'_2) \quad (1.10.33)$$

这个等式的意义是,在方向 1 的光子偏振为  $\theta_1$  时,方向 2 的光子偏振为  $\theta'_2$  的概率为 1。根据 EPR 佯谬的前提②,测得方向 1 光子的偏振不扰动方向 2 的光子且能预言它的偏振,故这个偏振是实在性的元素,从式(1.10.31)和式(1.10.32b)可以得到

$$P_{12}(-, \theta_2) = P_{12}(\theta'_1, \theta_2) \quad (1.10.34)$$

用与上文同样的推理,可断定  $\theta'_1$  是实在性的元素,这相当于式(1.10.28b)和式(1.10.28c)。再考虑  $P_{12}(\theta_1, \theta_2) > 0$ 。既然  $\theta_1$  出现,就有  $\Pi^\lambda(2) = \theta'_2$ , 此处  $\Pi^\lambda(2)$  是方向 2 的光子在隐变量  $\lambda$  所确定状态中的偏振。由 EPR 佯谬前提②确定它是  $\theta'_2$ 。同理,有  $\Pi^\lambda(1) = \theta'_1$ 。这样就应有  $P_{12}(\theta'_1, \theta'_2) > 0$ , 和式(1.10.32c)矛盾。推理办法与 1.10.2 节是一样的。在文献[58]和文献[59]的实验中,  $|T|^2 = 0.70$ ,  $|R|^2 = 0.30$ , 算出  $\theta_1 = 74.3^\circ$ ,  $\theta_2 = 15.7^\circ$ ,  $\theta'_1 = -56.8^\circ$ ,  $\theta'_2 = -33.2^\circ$ 。实验测出  $P_{12}(\theta'_1, \theta_2) = P_{12}(\theta_1, \theta'_2) = 0.98$ ,  $P_{12}(\theta_1, \theta_2) = 0.099$ 。根据 EPR 佯谬的原则,应有

$$P_{12}(\theta'_1, \theta'_2) = 0.099 \times 0.98 \times 0.98 = 0.095$$

实验给出

$$P_{12}(\theta'_1, \theta'_2) = 0.0070 \pm 0.0005$$

和 EPR 预言相差 45 倍标准偏差。

### 1.10.4 三光子缠绕态的实验实现和对定域实在论的否定

以上描述的三粒子干涉仪实现起来是有困难的。三粒子缠绕态的优越性在于能够对量子力学与定域实在性理论的矛盾给予“非统计性”的实验证明。“统计性”的证明则需要测量许多对缠绕粒子积累的数据,塞林格的研究组<sup>[60]</sup>提出用两对偏振缠绕光子实现三个光子的缠绕态,余下一个独立光子。这个想法已由同研究组在实验中实现<sup>[61]</sup>。在实验装置示意图 1.51 中,紫外光短脉冲经过 BBO 晶体产生两对缠绕光子,每一对缠绕光子的偏振状态由下式给出:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_a |V\rangle_b - |V\rangle_a |H\rangle_b)$$

它代表  $a$  与  $b$  两束的偏振态的两种可能。 $H$  是水平偏振, $V$  是垂直偏振,两种偏振可能是相干叠加的。束  $a$  射入偏振分束器(图 1.51 中  $PBS_1$ ),垂直偏振光子被反射,而水平偏振光子则透射进入探测器 T。束  $b$  射入与偏振无关的分束器(图 1.51 中 BS),50%透射进入探测器  $D_3$ ,50%被反射进入另

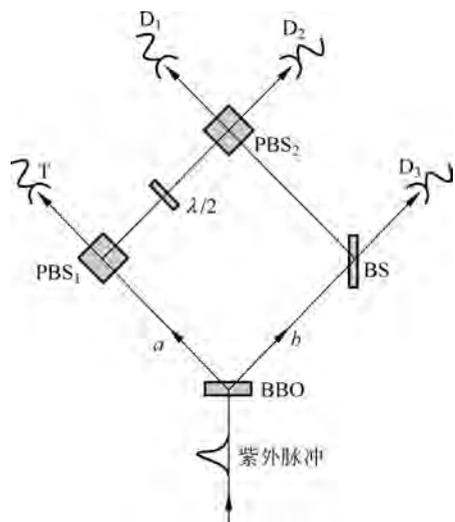


图 1.51 三光子缠绕态产生实验装置示意图

一个偏振分束器  $PBS_2$ , 在此处  $H$  偏振光子透射进入探测器  $D_1$  而  $V$  偏振光子被反射进入探测器  $D_3$ 。设一个紫外光脉冲产生了两对缠绕光子, 而 4 个光子都分别被 4 个探测器  $T, D_1, D_2, D_3$  符合探测到。以下将要证明, 由于紫外光脉冲(约 200fs)远小于光子的相干时间(实验中达到 500fs), 当两对缠绕光子中的一个光子(触发光子)被探测器  $T$  记录时, 其他三个光子即构成偏振缠绕光子: 不可能区分哪两个光子本属于一对缠绕光子。理由如下: 当符合发生时, 探测器  $T$  记录的触发光子是  $H$  偏振的; 它的伴侣一定是  $V$  偏振的, 沿  $b$  束到达  $BS$ 。在此它有 50% 的概率前往探测器  $D_3$  并被记录到, 另外有 50% 的概率被反射到达  $PBS_2$ , 再被反射进入探测器  $D_2$ 。先考虑第一种可能。此时, 探测器  $D_1$  和  $D_2$  记录的必然是另一对缠绕光子。沿  $a$  束的光子必然是  $V$  偏振的, 它在  $PBS_1$  处被反射到达  $PBS_2$ 。在此以前它通过半波片(图 1.51 中  $\lambda/2$ ), 偏振被旋转  $45^\circ$ , 成为  $V$  与  $H$  的等权重相干叠加。沿  $b$  束的光子是  $H$  偏振的, 在  $PBS_2$  处透射进入探测器  $D_1$ 。当  $a$  束光子到达  $PBS_2$  时, 其  $H$  偏振成分(50%)透射进入探测器  $D_2$ 。这一对分别被  $D_1, D_2$  记录, 与前一队组成四重符合。探测器记录的是

$$|H\rangle_1 |H\rangle_2 |V\rangle_3 \quad (1.10.35)$$

第二种可能是触发光子与其伴侣分别被探测器  $T$  和  $D_2$  记录。第二对光子中沿  $b$  束的是  $H$  偏振的, 它在  $BS$  处透射进入  $D_3$ , 而它的伴侣在  $PBS_1$  处因其  $V$  偏振被反射, 通过半波片  $\lambda/2$  到达  $PBS_2$ , 并在此处因其  $V$  成分(50%)被反射而到达  $D_1$ 。探测器记录的是

$$|V\rangle_1 |V\rangle_2 |H\rangle_3 \quad (1.10.36)$$

一般来说, 两个可能状态式(1.10.35)与式(1.10.36)并不形成相干叠加, 因为它们源自两个独立光子对, 它们在原则上是可以区分的, 例如根据不同的发射时间。但这种信息可以因紫外激光的短暂(200fs)和光子相干时间很长而被涂消, 此时就形成了 3 个偏振缠绕光子的 GHZ(Grunberger-Horne-Zeilinger)态:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_1 |H\rangle_2 |V\rangle_3 + |V\rangle_1 |V\rangle_2 |H\rangle_3) \quad (1.10.37)$$

上式两项中间的加号需要证明。初始两对光子的状态为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_a |V\rangle_b - |V\rangle_a |H\rangle_b)(|H\rangle'_a |V\rangle'_b - |V\rangle'_a |H\rangle'_b) \quad (1.10.38)$$

不带撇的和带撇的极化状态分别指第一对光子和第二对光子。在装置中, 式(1.10.38)的各分量演化为

$$\left. \begin{aligned} |H\rangle_a &\rightarrow |H\rangle_T, & |H\rangle_b &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_1 + |H\rangle_3) \\ |V\rangle_a &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|V\rangle_1 + |V\rangle_2), & |V\rangle_b &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(|V\rangle_2 + |V\rangle_3) \end{aligned} \right\} \quad (1.10.39)$$

第二对光子的演化与第一对相似。只取对四重符合有贡献的项, 得到

$$\frac{1}{2}\{|H\rangle_T(|H\rangle'_1 |H\rangle'_2 |V\rangle_3 + |V\rangle'_1 |V\rangle_2 |H\rangle'_3) + (|H\rangle_1 |H\rangle_2 |V\rangle'_3 + |V\rangle_1 |V\rangle'_2 |H\rangle_3)\} \quad (1.10.40)$$

如果两对光子不能区别, 就有

$$\frac{1}{\sqrt{2}} |H\rangle_T (|H\rangle_1 |H\rangle_2 |V\rangle_3 + |V\rangle_1 |V\rangle_2 |H\rangle_3) \quad (1.10.41)$$

这印证了式(1.10.37)。在实验中如何能证明这是 3 个光子的缠绕态而不是这两项的混合态呢? 尽管在实验中确证了上式中的两种偏振状态,但这还不够,还要证明它们是相干叠加的。在  $D_1$  前的检偏器置于  $45^\circ$ , 即  $|45^\circ\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|H\rangle_1 + |V\rangle_1)$ , 从而将上面的状态投影到

$$\frac{1}{\sqrt{2}} |45^\circ\rangle_1 (|H\rangle_2 |V\rangle_3 + |V\rangle_2 |H\rangle_3)$$

将括号中的光子 2 和光子 3 的状态用  $|45^\circ\rangle, |-45^\circ\rangle$  基表示, 有

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|45^\circ\rangle_2 |45^\circ\rangle_3 - |-45^\circ\rangle_2 |-45^\circ\rangle_3)$$

即光子 2 和光子 3 偏振态相同。 $|45^\circ\rangle_2 |-45^\circ\rangle_3$  和  $|-45^\circ\rangle_2 |45^\circ\rangle_3$  态的不存在是光子偏振缠绕的明证。图 1.52 给出了三光子缠绕的证明。四重符合计数作为  $a$  束光程延迟的函数绘于图 1.52(a), 偏振  $|45^\circ\rangle_1 |-45^\circ\rangle_2 |-45^\circ\rangle_3$  为实方点,  $|45^\circ\rangle_1 |-45^\circ\rangle_2 |45^\circ\rangle_3$  为实圆点。当延迟为 0 时两条曲线的差别说明相干叠加, 即后一种偏振状态不存在。图 1.52(b) 为  $D_1$  偏振置于  $0^\circ$  时的情况。测量结果的可见度高达 75%。延迟增加, 两对光子趋于不能辨认, 相干趋于消失。当然也可以认为, 在零延迟时  $D_1$  和  $D_3$  的光子由于  $D_2$  的光子被投影到  $|-45^\circ\rangle$  而被投影到二光子缠绕态。为了得到进一步的信息, 将  $D_1$  处的起偏器置于  $0^\circ$  ( $V$  极化)。GHZ 态另两个光子应处于  $|V\rangle_2 |H\rangle_3$  态, 它在  $|45^\circ\rangle$  基上不给出这两个光子的任何关联。在图 1.52(b) 中不论延迟大小, 方点与圆点没有区别, 证明不存在二光子关联。

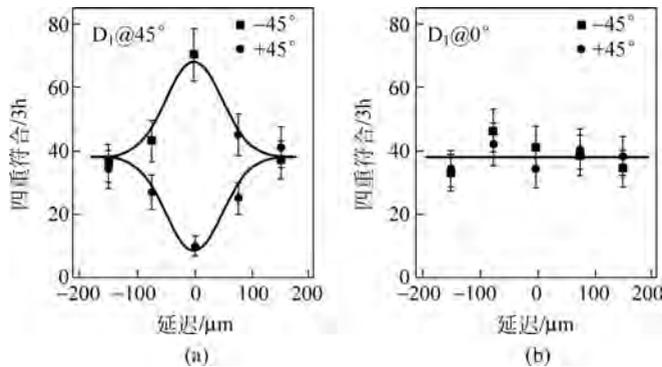


图 1.52 三光子缠绕态的实验证明

(a)  $D_1$  偏振置于  $45^\circ$ ; (b)  $D_1$  偏振置于  $0^\circ$

同一个研究组<sup>[62]</sup>用另一个 GHZ 态

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle_1 |H\rangle_2 |H\rangle_3 + |V\rangle_1 |V\rangle_2 |V\rangle_3) \quad (1.10.42)$$

来检验量子非定域性。考虑不同的极化测量: 从原来的  $H/V$  方向转  $45^\circ$ , 称为“ $H'/V'$  测量”; 或测量圆偏振, 称为“ $L/R$  测量”。新的极化态与原来的  $H/V$  态的关系为

$$\left. \begin{aligned} |H'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle + |V\rangle), & |V'\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle - |V\rangle) \\ |R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle + i|V\rangle), & |L\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|H\rangle - i|V\rangle) \end{aligned} \right\} \quad (1.10.43)$$

方便起见, 称  $H'/V'$  测量为“ $x$  测量”,  $L/R$  测量为“ $y$  测量”。GHZ 态(1.10.42)可以用新

的基表示,例如对  $yyx$  测量它可以表示为

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2}(|R\rangle_1 |L\rangle_2 |H'\rangle_3 + |L\rangle_1 |R\rangle_2 |H'\rangle_3 + |R\rangle_1 |R\rangle_2 |V'\rangle_3 + |L\rangle_1 |L\rangle_2 |V'\rangle_3) \quad (1.10.44)$$

用循环排列,可以得到对  $yxy$  和  $xyy$  测量的 GHZ 态。从这样的状态得出,对于两个光子,例如 1 和 2 进行测量,就可以确定地预言相应的第 3 个光子的极化状态。由于三光子缠绕态已经有了实验上有力的确证,定域实在论者应该对这些状态给予他们自己的诠释。预言与在测量中光子的距离和测量的时间顺序无关(假设对三个光子的测量是同时进行的)。EPR 佯谬定域性要求,对任何一个光子测量的结果应该和对另两个光子进行什么样子的测量及其结果无关。对于 GHZ 态的现实情况,必须假设每个光子对  $x$  测量和  $y$  测量都有“实在性的元素”,它们在测量结果中应该体现出来。记这些元素  $H'(V')$  为  $X_i = +1(-1)$ , 元素  $R(L)$  为  $Y_i = +1(-1)$ 。为了和 GHZ 态  $|\Psi\rangle$  的量子理论预言符合,测量  $yyx$  的结果要求  $Y_1 Y_2 X_3 = -1, Y_1 X_2 Y_3 = -1, X_1 Y_2 Y_3 = -1$ 。循环排列的结果也类似。根据定域实在论,任何一个特定的测量  $x$  都必须独立于对其他两个光子进行  $x$  或  $y$  测量。由于  $Y_i Y_i = +1$ , 有  $X_1 X_2 X_3 = (X_1 X_2 Y_3)(Y_1 X_2 Y_3)(Y_1 Y_2 X_3) = -1$ 。因此定域实在论的结论是,进行  $xxx$  测量的可能结果是  $V'V'V', H'H'V', H'V'H'$  和  $V'H'H'$ 。将  $|\Psi\rangle$  表示为  $H'/V'$  基,有

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2}(|H'\rangle_1 |H'\rangle_2 |H'\rangle_3 + |H'\rangle_1 |V'\rangle_2 |V'\rangle_3 + |V'\rangle_1 |H'\rangle_2 |V'\rangle_3 + |V'\rangle_1 |V'\rangle_2 |H'\rangle_3) \quad (1.10.45)$$

因此,量子力学给出的  $xxx$  测量结果和定域实在论直接矛盾,结果示于图 1.53。

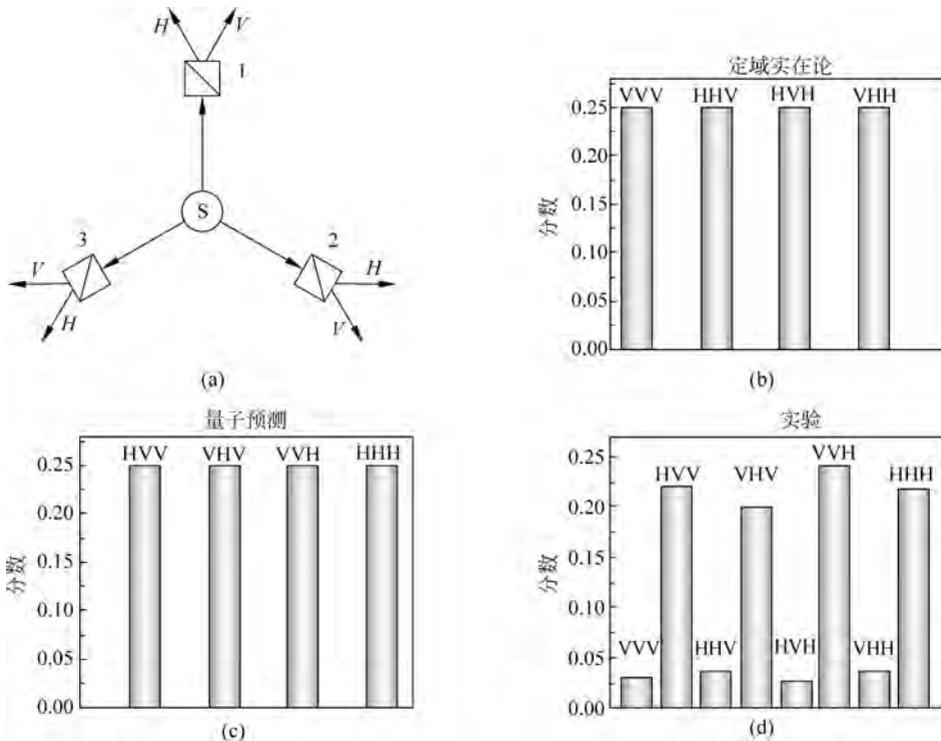


图 1.53 三光子缠绕 GHZ 态导致量子力学与定域实在论矛盾

取自文献[62]

### 1.10.5 在缠绕与非定域性意义下的 EPR 佯谬

EPR 佯谬的原始意图是要说明量子力学是不完备的, 因为在二粒子系统的一维运动中,  $x_2$  和  $p_2$  的值可以准确决定, 因此  $(\Delta x_2)^2 (\Delta p_2)^2 \geq \hbar^2/4$  被破坏。考虑 EPR 算符  $\hat{x}_1 + \hat{x}_2$  和  $\hat{p}_1 - \hat{p}_2$ 。联合不确定性乘积  $(\Delta(\hat{x}_1 + \hat{x}_2))^2 (\Delta(\hat{p}_1 - \hat{p}_2))^2$  的值决定性地依赖量子态的性质: 是可分离的还是缠绕的。段鲁明等人<sup>[63]</sup>从可分离性定义出发, 证明了一个定理: 对可分离的连续变量状态, 联合不确定性乘积是有下限的, 而它的值是源于不确定性关系的。因此破坏这个下限就是不可分离性(缠绕)的充要判据。S. Manichini 等人<sup>[64]</sup>证明了一个定理: 对于任意可分离量子态定义算符  $u = q_1 + q_2, v = p_1 - p_2$ , 考虑到  $[q_j, p_j]$  是个  $c$  数( $j = 1, 2$ ), 不等式  $\langle (\Delta u)^2 \rangle \langle (\Delta v)^2 \rangle \geq |[\![q_1, p_1]\!]|^2$  成立。对我们考虑的情况, 这个定理的特例是:

$$(\Delta(\hat{x}_1 + \hat{x}_2))^2 (\Delta(\hat{p}_1 - \hat{p}_2))^2 \geq \hbar^2$$

最大缠绕 EPR 态在实验室中不能实现, 但一对参量下转换光子在适当条件下可以认为是这样态的近似。罗切斯特大学的研究组<sup>[65]</sup>进行了上述光子对的大距离位置和动量关联测量。BBO 晶体用 390nm 激光束泵浦可产生参量下转换光子对。用棱镜把泵浦光和下转换光分离。两个光子极化态正交, 可以用极化分束器(PBS)将它们分开。滤光器后面的显微镜物镜将通过的光聚焦到雪崩光二极管(APD)单光子计数装置上。

在测量光子的位置关联时, 在分束器前放置一个透镜, 将晶体的出射面聚焦在两个狭缝的平面上成像(图 1.54(a))。一个狭缝固定在最大信号强度处, 移动另一个狭缝以记录作为狭缝位移函数的光子符合计数率。要测量光子的横向动量关联, 去掉 PBS 前的透镜, 代以在每一个臂上各放一个透镜, 透镜距狭缝平面距离为  $f$ (焦距)(图 1.54(b))。这两个透镜将横向动量映射为横向位置, 使具有横向动量  $\hbar k_\perp$  的光子聚集在狭缝平面后落在  $f k_\perp / k$  处。将一个狭缝固定, 移动另一个狭缝以得到符合计数率分布。

归一化符合分布后, 得到条件概率函数为  $P(x_2 | x_1)$  和  $P(p_2 | p_1)$ , 绘于图 1.55。

这些条件概率密度函数就用以计算在给定光子 1 的位置或动量条件下, 光子 2 的位置和动量不确定性:

$$\left. \begin{aligned} (\Delta x_2 | x_1)^2 &= \int x_2^2 P(x_2 | x_1) dx_2 - \left( \int x_2 P(x_2 | x_1) dx_2 \right)^2 \\ (\Delta p_2 | p_1)^2 &= \int p_2^2 P(x_2 | x_1) dx_2 - \left( \int p_2 P(x_2 | x_1) dx_2 \right)^2 \end{aligned} \right\} \quad (1.10.46)$$

实验数据给出

$$(\Delta x_2 | x_1)^2 (\Delta p_2 | p_1)^2 = 0.01 \hbar^2 \quad (1.10.47)$$

这个结果证实了光子的关联性是如此之好, 而 EPR 佯谬定域要求被破坏得如此厉害。但不要把此关系(1.10.47)当作不确定性关系, 因为均方差值是在不同条件下计算的。不确定性关系  $(\Delta x_2)^2 (\Delta p_2)^2 \geq \hbar^2/4$  并未被破坏, 两个均方差值同时为 0 不可能在任何量子状态上实现。对可分离态用联合概率  $P(x_1, x_2)$  和  $P(p_1, p_2)$  计算均方差, 得到的结果是  $[\Delta(\hat{x}_1 + \hat{x}_2)]^2 [\Delta(\hat{p}_1 - \hat{p}_2)]^2 \geq \hbar^2$ 。

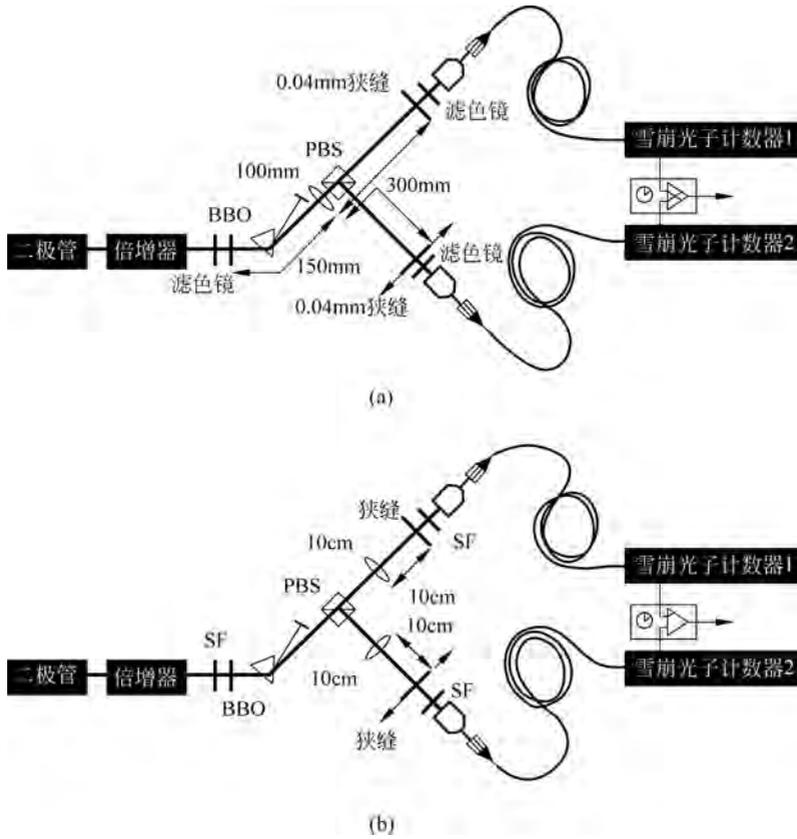


图 1.54 测量光子关联的实验装置示意图  
取自文献[65]

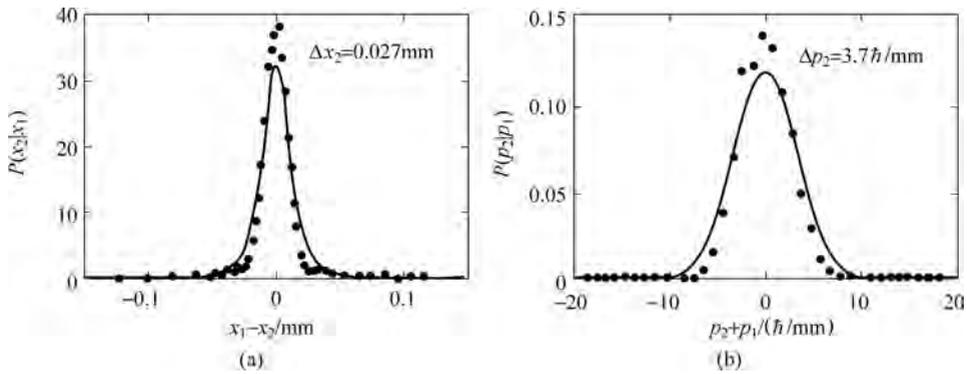


图 1.55 条件概率分布函数  
取自文献[65]

### 1.10.6 单光子的非定域性

在 1.8 节中讨论的贝尔不等式实验检验涉及两个纠缠粒子的关联。考虑一个单个光子打到分束器上。它反向和透射的概率幅相等。状态由下式描述：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[|1\rangle_T |0\rangle_R + |0\rangle_T |1\rangle_R] \quad (1.10.48)$$

此处 T(R)指分束器的透射(反射)臂。以光子数状态为基, T 和 R 的关联互相排斥: 如果在 T 臂探测器计数, R 臂的探测器必然无反应, 反之亦然。但这并非我们感兴趣的量子力学关联(它涉及和量子数互补的相位)。将式(1.10.48)和式(1.8.6)的贝尔基比较, 可以看出它们在数学上是同构的。意思是一个光子也可以用来检验贝尔不等式, 只要把一个相位适当安排进去。此时 T 和 R 臂的探测器可以表明单个光子的两个“版本”之间的关联, 即使探测器相距很远。实验研究是由 S. M. Tan, D. F. Walls 和 M. J. Collett<sup>[66]</sup> 建议的。式(1.8.6)中光子对的关联可以通过调整起偏器角度设置测量。单光子和局域振子在分束器上混合(图 1.56), 探测器无法判断探测到的

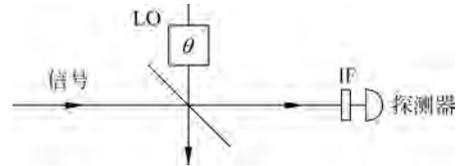


图 1.56 信号光子与局域振子(LO)产生光子的混合  
取自文献[67]

的光子是来自信号(单光子)还是来自振子所产生的相干态光子  $\alpha e^{i\theta}$ 。相位  $\theta$  等同于 1.8 节中起偏器的角度。实验研究由 B. Hessmo 等人<sup>[67]</sup> 完成。他们对 Tan, Walls 和 Collett<sup>[66]</sup> 的原始建议作了一些改动, 试验安排示于图 1.57。激光源产生飞秒脉冲, 波长为 90nm, 它泵浦了一个 BBO 下转换晶体, 辅助光子进入探测器  $D_T$ 。  $D_T$  收到光子就说明下转换光子对中的另一个信号光子即将进入分束器。局域振荡的由主激光器分出一束来驱动。设置并调整延迟线, 保证振子光子和信号光子同时达到分束器。强度控制使振子光强度和信号强度相匹配以得到高度关联的测量可见度。振子光子的极化调整为和信号光子的极化正交。振子光子的相位由一臂的双折射晶体沿其光轴的转动来调整。  $D_1, D_2$  和  $D_T$  的三重符合作为两臂相位差的函数记录下来, 如图 1.58 所示。如果信号光子或振子光子遗失, 就会得到平坦的与相位无关的关联曲线。用这个本底关联来修正关联-相移曲线, 得到了可见度  $91\% \pm 3\%$ 。贝尔不等式被破坏达到 71%。如文献[66]指出的, 这个关联是纯量子力学的, 其结果不同于经典波动理论, 更不用说经典微粒理论了。

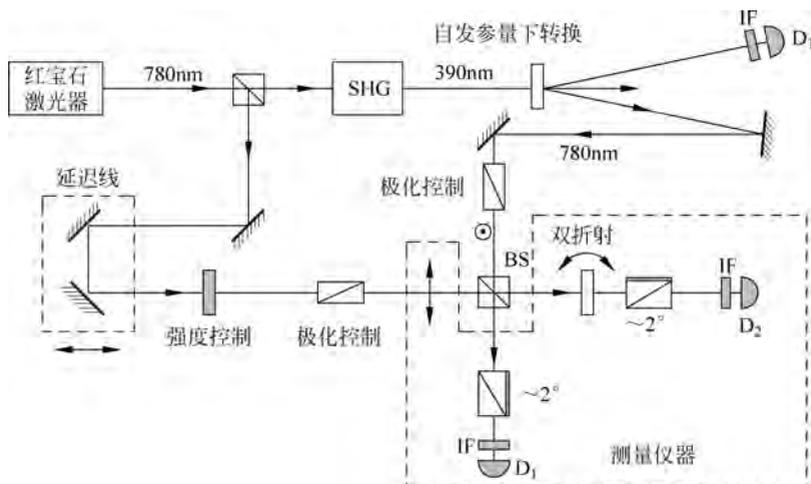


图 1.57 实验安排

参量下转换的一个单光子与局域振子的光子在分束器上混合  
在分束器的输出两臂各有一个探测器, 取自文献[67]

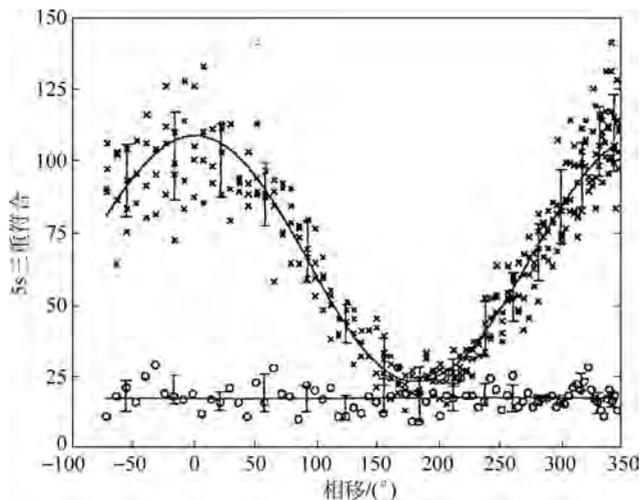


图 1.58 实验数据和曲线拟合

振荡曲线表明单光子两个“版本”的非经典关联(作为相移的函数),取自文献[67]

## 1.11 量子非破坏性实验简介

科学与技术的发展需要越来越高的精确度,例如引力波探测、压缩光、单原子阱等。在计算机科学的信息处理与传递中,量子测量也很重要。量子测量的理论也需要发展从而满足这些需要。量子非破坏性实验(quantum non-demolition experiment, QND 实验)和回避反作用实验(back action evading experiments, BAE 实验)都能在不不确定原理这一基础性约束的制约之下提供最佳结果<sup>[68]</sup>。我们从一个例子开始。引力波探测器由重以吨计的 Al(Si, Nb)棒构成,它们在引力波的驱动之下以极小的振幅(估计为  $\delta x \approx 10^{-19}$  cm)振动。如果精确度要求如此之高,那么这样巨大的金属棒也要用量子力学处理。测量的重复频率是  $\tau \approx 10^{-3}$  s。如果从测量振动的振幅来测引力波,则相应的  $\Delta x$  会有动量的扰动  $\Delta p \geq \frac{\hbar}{2\Delta x}$ ,亦即有速度不确定性  $\Delta v \geq \frac{\hbar}{2m\Delta x}$ 。它在时间  $\tau$  内引起位置的不确定性  $(\Delta x)' \geq \frac{\hbar\tau}{2m\Delta x}$ 。代入  $\Delta x = 10^{-19}$  cm,  $m = 10t = 10^7$  g, 得  $(\Delta x)' \geq 5 \times 10^{-19}$  cm, 大于位置测量要求的精确度。这样,下一次测量就无法以需要的精确度完成。将棒做得更重是不现实的,进一步缩小测量时间间隔会减弱引力波信号。之所以造成这种情况,是因为位置测量是一种仪器对体系的反作用(back action),它带来了对动量(位置的共轭力学量)的干扰。这种污染被反馈回体系,在它的演化中造成附加的位置误差,破坏了下一次精确测量位置的可能性。我们能否更聪明一点呢? 尝试测量金属棒在引力波驱动下获得的动量。令动量测量所需的精确度为  $\Delta p \approx 10^{-9}$  g · cm/s。相应的位置测量的不确定性为  $\Delta x > \frac{\hbar}{2\Delta p} \approx 5 \times 10^{-19}$  cm。在  $\tau \approx 10^{-3}$  s 后再进行动量测量。由于悬挂的金属棒在很短的时间(远小于振荡周期)内可以认为是自由的,它的动量是守恒的,不确定  $\Delta x$  不能由自由演化引发新的动量不确定性

$(\Delta p)'$ , 因此, 下一次动量测量仍能以同样精度进行。当然, 一次次的动量测量会使位置不确定积累, 但这不会带来不利影响。另外, 引力波是会使金属棒动量变化的, 测量动量以判断引力波的强度正是基于此点。但这是外力脉冲, 体系的动力学演化仍是自由物体的。在自由物体演化中动量是守恒的, 污染不能反馈进来。基于以上讨论, 自由物体的动量测量可以是量子非破坏性的, 而位置测量不是。或者说自由运动的动量是量子非破坏性的可观测量, 而位置测量不是。综上所述, 在位置测量中  $\delta x = p\tau/m$ ,  $p$  的不确定性通过这个关系产生  $x$  的新不确定性。在自由运动中,  $p = \text{const}$  与  $x$  无关, 因而动量测量产生的  $x$  的不确定性反馈不进来。在此, 运动常数是起决定作用的。

### 1.11.1 标准量子极限与反作用回避实验

考虑一个自由粒子。设在  $t=0$  时进行的位置测量不确定值是  $(\Delta x)_1$ 。相应的仪器反作用带来的动量不确定值是  $(\Delta p)_{ba} = \frac{\hbar}{2(\Delta x)_1}$ 。记  $(\Delta x)_2$  为在时间  $t=\tau$  进行的位置测量误差。在时间  $\tau$  内反馈的污染造成的位置不确定值是

$$(\Delta x)' = \frac{(\Delta p)_{ba}\tau}{m} = \frac{\hbar\tau}{2m(\Delta x)_1}$$

两次位置测量可以确定动量的值

$$p = m \frac{x_2 - x_1}{\tau} \quad (1.11.1)$$

动量的不确定值为

$$\Delta p = \frac{m}{\tau} \left[ (\Delta x)_1^2 + \frac{\hbar^2 \tau^2}{4m^2 (\Delta x)_1^2} + (\Delta x)_2^2 \right]^{1/2} \quad (1.11.2)$$

$(\Delta x)_1$  取什么值才能使  $\Delta p$  尽量小呢? 简单的计算给出

$$(\Delta x)_{1 \min} = \sqrt{\frac{\hbar\tau}{2m}} \equiv \Delta x_{\text{SQL}} \quad (1.11.3)$$

它使由  $(\Delta x)_1$  导致的  $\Delta p = \sqrt{\frac{\hbar m}{\tau}}$ 。定义

$$\Delta p_{\text{SQL}} = \sqrt{\frac{\hbar m}{2\tau}} \quad (1.11.4)$$

式(1.11.3)和式(1.11.4)定义了  $x$  和  $p$  误差的“标准量子极限”(standard quantum limit, SQL)。式(1.11.4)的定义有一定任意性, 它满足

$$\Delta x_{\text{SQL}} \Delta p_{\text{SQL}} = \frac{\hbar}{2}$$

式(1.11.2)中的  $\Delta p$  显然比  $\Delta p_{\text{SQL}}$  大, 但属于同量级。这两个量的关系用符号  $\gtrsim$  表示, 即有

$$\Delta p \gtrsim \Delta p_{\text{SQL}} \quad (1.11.5)$$

再考虑谐振子

$$\begin{aligned} x(t) &= x(0) \cos \omega t + \frac{p(0)}{m\omega} \sin \omega t \\ &\equiv x_1 \cos \omega t + x_2 \sin \omega t \end{aligned} \quad (1.11.6)$$

$x_1$  和  $x_2$  称为谐振子的“求积振幅”(quadrature amplitude), 它们实际上是两个积分常数。

从  $x$  和  $p$  间的不确定关系可知,确定求积振幅的精确度需满足

$$\Delta x_1 \Delta x_2 \geq \frac{\hbar}{2m\omega} \quad (1.11.7)$$

如果它们有相同的精确度,则有

$$\Delta x_1 = \Delta x_2 \geq \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad (1.11.8)$$

而标准量子极限就是

$$\Delta x_{\text{SQL}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad (1.11.9)$$

谐振子的能量为

$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 = \frac{1}{2}m\omega^2(x_1^2 + x_2^2)$$

此处  $A$  是振幅。如果振幅为小量,则

$$\begin{aligned} \Delta E &= m\omega^2 A \Delta A_{\text{SQL}} = m\omega^2 \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \\ &= \sqrt{\hbar\omega E} \end{aligned} \quad (1.11.10)$$

标准量子极限可以逾越吗? 答案是肯定的。在得到这个极限时用了不确定关系,但二者不是等同的。标准量子极限与如何进行测量有关。以谐振子为例,它的能量取决于振幅  $A$ , 而和相角  $\omega t$  无关。在测量求积振幅时,振幅和相角都要测。关于相角的信息对能量是没有用的,但仪器在测量相角时对体系的反作用会被反馈回体系造成附加的能量不确定性。因此测量能量最好的办法是不要任何关于相角的信息。这是 P. N. Lebedev 的办法: 通过测量辐射压力获得辐射能量密度。可以用很长的时间来完成测量,相角的信息是不相干的。在尺度为  $d$  的腔体中用可移动的壁(动量不确定性  $\Delta p$ )测量电磁能量  $E$ , 其不确定性为

$$\Delta E \approx \frac{d}{\tau} \Delta p \quad (1.11.11)$$

此处  $\tau$  是测量时间。如果用足够长的时间进行很精确的动量测量,可以使  $\Delta E$  足够小,小于标准量子极限。这类实验称为“反作用回避实验”(BAE 实验)。BAE 实验的条件可以从考虑体系和测量仪器间的相互作用得到。体系的可观测量  $\hat{A}$  和仪器的可观测量  $\hat{M}$ (仪器的读数)耦合哈密顿(Hamilton)量记为  $\hat{H}_1$ :

$$\hat{H}_1 = f(\hat{A}, \hat{M}) \quad (1.11.12)$$

这个相互作用正是仪器对体系的反作用,它通过量子运动方程导致  $\hat{A}$  的变化:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_1, \hat{A}] \quad (1.11.13)$$

因此,如果  $\hat{A}$  和  $\hat{H}_1$  对易,则在测量中对  $\hat{A}$  就没有反作用。如果  $\hat{H}_1$  中不含体系的任何与  $\hat{A}$  不对易的可观测量,它就和  $\hat{A}$  对易,即  $\hat{H}_1$  不会导致  $\hat{A}$  的本征态间的跃迁。以上粗略的讨论在文献[68]中有严格的证明。

### 1.11.2 量子非破坏性实验

可观测量  $\hat{A}$  的量子非破坏性实验(QND 实验)是对  $\hat{A}$  的一系列精确测量,在各次测量之间的演化中没有与  $\hat{A}$  不对易的可观测量的污染反馈给  $\hat{A}$ 。只有很特殊的可观测量才能对污染反馈有免疫性。它们被称为“QND 可观测量”。如果,有且只有一个系统在海森堡图画中自由演化时与在不同时间的  $\hat{A}(t)$  算符对易,即

$$[\hat{A}(t_i), \hat{A}(t_j)] = 0, \quad t_i \neq t_j \quad (1.11.14)$$

$\hat{A}$  就是 QND 可观测量。为了强调 QND 测量的重要性,仍以引力波探测为例。这个探测需要多次在不同时间重复对一个可观测量进行测量。如果我们有大量同样的系统处于相同状态,就可以在不同时间对许多系统进行测量,不必考虑一次测量对一个系统以后演化的影响。但对于引力波探测器,系统是唯一的。只能对一个棒多次进行测量,因此要求这些测量彼此不相干扰。QND 测量是绝对必须的。令  $\hat{A}$  为 QND 可观测量。在海森堡图画中,在  $t_0$  时的测量得到  $A(t_0)$ 。这个测量制备了状态  $|\psi_0\rangle$ ,它是  $\hat{A}(t_0)$  的本征态,相应的本征值为  $A(t_0)$ 。由于  $\hat{A}(t_0), \hat{A}(t_1), \hat{A}(t_2), \dots$  彼此对易,  $|\psi_0\rangle$  也是  $\hat{A}(t_1), \hat{A}(t_2), \dots$  的本征态,相应的本征值为  $A(t_1), A(t_2), \dots$ 。即从第一次测量的结果就可以计算出以后任何时间的本征值。在时间  $t_1, t_2, \dots$  进行的完全后继测量必须给出已知的本征值。这里至关重要的是以下两个关系:

$$[\hat{A}(t), \hat{H}_1] = 0 \quad (1.11.15)$$

$$[\hat{A}(t_i), \hat{A}(t_j)] = 0, \quad t_i \neq t_j \quad (1.11.16)$$

第一个关系保证在测量时没有仪器对可观测量产生反作用。当然对其他可观测量,例如  $\hat{C}$ , 不满足式(1.11.15)将受到反作用而被污染。第二个关系保证被污染的可观测量  $\hat{C}$  等不会在体系的自由演化(此时仪器的相互作用已关闭)中将污染反馈给  $\hat{A}$ 。C. M. Caves<sup>[69]</sup>等针对引力波探测的实际需要( $\hat{H}_1$  不关闭)研究了  $\hat{A}$  仍然成为 QND 可观测量的条件。引力波探测器要通过测量判断作用于棒上的力  $F(t)$ ,此过程中的动量要随时间变化。在理论上和实验上都还有许多更深入的讨论<sup>[70]</sup>。但从量子力学最基础的要求而言,式(1.11.15)与式(1.11.16)给出的两个关系是必须满足的。

## 参考文献

- [1] FEYNMAN R P, LEIGHTON R B, SANDS M. The Feynman lectures on physics: III-quantum mechanics[M]. Reading: Addison-Wesley, 1965.
- [2] ZEILINGER A, GÄHLER R, SHULL C G, et al. Experimental status and recent results of neutron interference optics[C]//Neutron scattering-1981 (AIP Conference Proceedings, vol. 89, no. 1). [S. l.]: American Institute of Physics, 1982: 93-100.
- [3] ZEILINGER A, GÄHLER R, SHULL C G, et al. Single- and double-slit diffraction of neutrons[J]. Reviews of Modern Physics, 1988, 60(4): 1067-1073.

- 
- [4] TONOMURA A, ENDO J, MATSUDA T, et al. Demonstration of single electron buildup of an interference pattern[J]. *American Journal of Physics*, 1989, 57(2): 117-120.
- [5] CHAPMAN M S, HAMMOND T D, LENEFF A, et al. Photon scattering from atoms in an atom interferometer: Coherence lost and regained[J]. *Physical Review Letters*, 1995, 75(21): 3783-3787.
- [6] DÜRR S, NONN T, RAMPE G. Origin of quantum-mechanical complementarity probed by a which-way experiment in an atom interferometer[J]. *Nature*, 1998, 395: 33-37.
- [7] COHEN-TANNOUDJI C. *Atoms in electromagnetic fields*[M]. Singapore: World Scientific, 2004.
- [8] KUNZE S, DÜRR S, REMPE G. Bragg scattering of slow atoms from a standing light wave[J]. *Europhysics Letters (EPL)*, 1996, 34(5): 343-348.
- [9] SCULLY M O, ENGLERT B G, WALTHER H. Quantum optical tests of complementarity[J]. *Nature*, 1991, 351: 111-116.
- [10] MARTINI F D, DENARDO G, ZEILINGER A. *Quantum Interferometry: Proceedings of the Adriatico Workshop*[M]. Singapore: World Scientific, 1994.
- [11] GRANGIER P, ROGER G, ASPECT A. Experimental evidence for a photon anticorrelation effect on a beam splitter: A new light on single-photon interferences[J]. *Europhysics Letters (EPL)*, 1986, 1(4): 173-179.
- [12] DIRAC P A M. *The principles of quantum mechanics*[M]. 4th edition. London: Oxford University Press, 1958.
- [13] FORRESTER A T, GUDMUNDSEN R A, JOHNSON P O. Photoelectric mixing of incoherent light [J]. *Physical Review*, 1955, 99(6): 1691-1700.
- [14] HANBUR Y BROWN R, TWISS R Q. A test of a new type of stellar interferometer on sirius[J]. *Nature*, 1956, 178: 1046-1048.
- [15] PFLEEGOR R L, MANDEL L. Interference of independent photon beams[J]. *Physical Review*, 1967, 159(5): 1084-1088.
- [16] PAUL H. Interference between independent photons[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1986, 58(1): 209-231.
- [17] MANDEL L. Quantum theory of interference effects produced by independent light beams[J]. *Physical Review*, 1964, 134(1A): A10-A15.
- [18] HORNE M A, SHIMONY A, ZEILINGER A. Two-particle interferometry[J]. *Physical Review Letters*, 1989, 62(19): 2209-2212.
- [19] GREENBERGER D M, HORNE M A, ZEILINGER A. Multiparticle interferometry and the superposition principle[J]. *Physics Today*, 46(8): 22-29.
- [20] BURNHAM D C, WEINBERG D L. Observation of simultaneity in parametric production of optical photon pairs[J]. *Physical Review Letters*, 1970, 25(2): 84-87.
- [21] HONG C K, MANDEL L. Theory of parametric frequency down conversion of light[J]. *Physical Review A*, 1985, 31(4): 2409-2418.
- [22] HONG C K, OU Z Y, MANDEL L. Measurement of subpicosecond time intervals between two photons by interference[J]. *Physical Review Letters*, 1987, 59(18): 2044-2046.
- [23] LEGERO T, WILK T, HENNRICH M, et al. Quantum beat of two single photons[J]. *Physical Review Letters*, 2004, 93(7): 070503.
- [24] MANDEL L. Photon interference and correlation effects produced by independent quantum sources [J]. *Physical Review A*, 1983, 28(2): 929-943.
- [25] FRANSON J D. Bell inequality for position and time[J]. *Physical Review Letters*, 1989, 62(19): 2205-2208.
- [26] KWIAT P G, STEINBERG A M, CHIAO R Y. High-visibility interference in a bell-inequality

- experiment for energy and time[J]. *Physical Review A*, 1993, 47(4): R2472-R2475.
- [27] TITTEL W, BRENDEL J, GISIN B, et al. Experimental demonstration of quantum correlations over more than 10 km[J]. *Physical Review A*, 1998, 57(5): 3229-3232.
- [28] ZOU X Y, WANG L J, MANDEL L. Induced coherence and indistinguishability in optical interference[J]. *Physical Review Letters*, 1991, 67(3): 318-321.
- [29] KWIAT P G, STEINBERG A M, CHIAO R Y. Observation of a “quantum eraser”: A revival of coherence in a two-photon interference experiment[J]. *Physical Review A*, 1992, 45(11): 7729-7739.
- [30] KIM Y H, YU R, KULIK S P, et al. Delayed choice quantum eraser[J]. *Physical Review Letters*, 2000, 84(1): 1-5.
- [31] EINSTEIN A, PODOLSKY B, ROSEN N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? [J]. *Physical Review*, 1935, 47(10): 777-780.
- [32] BOHM D. *Quantum theory*[M]. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1951.
- [33] BOHR N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? [J]. *Physical Review*, 1935, 48(8): 696-702.
- [34] ROSENFELD L. *The wave-particle dilemma*[C]//Mehra J. *The physicist’s conception of nature*. Dordrecht: D. Reidel Publishing Company, 1973: 251-263.
- [35] BELL J S. On the problem of hidden variables in quantum mechanics [J]. *Reviews of Modern Physics*, 1966, 38(3): 447-452.
- [36] BELL J S. On the Einstein Podolsky Rosen paradox[J]. *Physica Physique Fizika*, 1964, 1(3): 195-200.
- [37] CLAUSER J F, SHIMONY A. Bell’s theorem, experimental tests and implications[J]. *Reports on Progress in Physics*, 1978, 41(12): 1881-1927.
- [38] CLAUSER J F, HORNE M A, SHIMONY A, et al. Proposed experiment to test local hidden-variable theories[J]. *Physical Review Letters*, 1969, 23(15): 880-884.
- [39] FREEDMAN S J, CLAUSER J F. Experimental test of local hidden-variable theories[J]. *Physical Review Letters*, 1972, 28(14): 938-941.
- [40] HOLT R A, PIPKIN F M. Quantum mechanics vs. hidden variables: Polarization correlation measurement on an atomic mercury cascade[R]. Harvard University Preprint, Boston: [S. N. ], 1971.
- [41] CLAUSER J F. Experimental investigation of a polarization correlation anomaly[J]. *Physical Review Letters*, 1976, 36(21): 1223-1226.
- [42] FRY E S, THOMPSON R C. Experimental test of local hidden-variable theories[J]. *Physical Review Letters*, 1976, 37(8): 465-468.
- [43] ASPECT A, GRANGIER P, ROGER G. Experimental tests of realistic local theories via Bell’s theorem[J]. *Physical Review Letters*, 1981, 47(7): 460-463.
- [44] ASPECT A, GRANGIER P, ROGER G. Experimental realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment: A new violation of Bell’s inequalities[J]. *Physical Review Letters*, 1982, 49(2): 91-94.
- [45] KWIAT P G, EBERHARD P H, Steinberg A M, et al. Proposal for a loophole-free bell inequality experiment[J]. *Physical Review A*, 1994, 49(5): 3209-3220.
- [46] KWIAT P G, MATTLE K, WEINFURTER H, et al. New high-intensity source of polarization-entangled photon pairs[J]. *Physical Review Letters*, 1995, 75(24): 4337-4341.
- [47] WHEELER J A. The “past” and the “delayed-choice” double slit experiment[M]//Marlow A R. *Mathematical foundations of quantum theory*. New York: Academic Press, 1978: 10-48.
- [48] HELLMUTH T, WALTHER H, ZAJONC A, et al. Delayed-choice experiments in quantum interference[J]. *Physical Review A*, 1987, 35(6): 2532-2541.
- [49] FEYNMAN R P. Simulating physics with computers [J]. *International Journal of Theoretical*

- Physics, 1982, 21(6-7): 467-488.
- [50] GREENBERGER D M, HORNE M A, ZEILINGER A. Going beyond Bell's theorem [C]// Kafatos M, Bell's theorem, quantum theory and conceptions of the universe. Doldbrecht; Kluwer Academic Publishers, 1989: 69-72.
- [51] GREENBERGER D M, HORNE M A, SHIMONY A, et al. Bell's theorem without inequalities [J]. American Journal of Physics, 1990, 58(12): 1131-1143.
- [52] MERMIN N D. Quantum mysteries revisited [J]. American Journal of Physics, 1990, 58(8): 731-734.
- [53] MERMIN N D. What's wrong with these elements of reality? [J]. Physics Today, 1990, 43(6): 9-11.
- [54] HARDY L. Quantum mechanics, local realistic theories, and lorentz-invariant realistic theories [J]. Physical Review Letters, 1992, 68(20): 2981-2984.
- [55] HARDY L. Nonlocality for two particles without inequalities for almost all entangled states [J]. Physical Review Letters, 1993, 71(11): 1665-1668.
- [56] JORDAN T F. Testing Einstein-Podolsky-Rosen assumptions without inequalities with two photons or particles with spin  $1/2$  [J]. Physical Review A, 1994, 50(1): 62-66.
- [57] GOLDSTEIN S. Nonlocality without inequalities for almost all entangled states for two particles [J]. Physical Review Letters, 1994, 72(13): 1951-1951.
- [58] TORGERSON J, BRANNING D, MONKEN C, et al. Experimental demonstration of the violation of local realism without bell inequalities [J]. Physics Letters A, 1995, 204(5): 323-328.
- [59] TORGERSON J, BRANNING D, MANDEL L. A method for demonstrating violation of local realism with a two-photon downconverter without use of Bell inequalities [J]. Applied Physics B, 1995, 60(2-3): 267-269.
- [60] ZEILINGER A, HORNE M A, WEINFURTER H, et al. Three-particle entanglements from two entangled pairs [J]. Physical Review Letters, 1997, 78: 3031-3034.
- [61] BOUWMEESTER D, PAN J W, DANIELL M, et al. Observation of three-photon greenberger-horne-zeilinger entanglement [J]. Physical Review Letters, 1999, 82: 1345-1349.
- [62] PAN J W, BOUWMEESTER D, DANIELL M, et al. Experimental test of quantum nonlocality in three-photon greenbergerhornezeilinger entanglement [J]. Nature, 2000, 403: 515-519.
- [63] DUAN L M, GIEDKE G, CIRAC J I, et al. Inseparability criterion for continuous variable systems [J]. Physical Review Letters, 2000, 84: 2722-2725.
- [64] MANCINI S, GIOVANNETTI V, VITALI D, et al. Entangling macroscopic oscillators exploiting radiation pressure [J]. Physical Review Letters, 2002, 88: 120401.
- [65] HOWELL J C, BENNINK R S, BENTLEY S J, et al. Realization of the einstein-podolsky-rosen paradox using momentum-and position-entangled photons from spontaneous parametric down conversion [J]. Physical Review Letters, 2004, 92: 210403.
- [66] TAN S M, WALLS D F, COLLETT M J. Nonlocality of a single photon [J]. Physical Review Letters, 1991, 66: 252-255.
- [67] HESSMO B, USACHEV P, HEYDARI H, et al. Experimental demonstration of single photon nonlocality [J]. Physical Review Letters, 2004, 92: 180401.
- [68] BRAGINSKY V B, VORONTSOV YU I, THORNE K S. Quantum nondemolition measurements [J]. Science, 1980, 209: 547-557.
- [69] CAVES C M, THORNE K S, DREVER R W P, et al. On the measurement of a weak classical force coupled to a quantum-mechanical oscillator. i. issues of principle [J]. Reviews of Modern Physics, 1980, 52: 341-392.
- [70] BRAGINSKY V B, KHALILI F Y, Thorne K S. Quantum measurement [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1992.

## 第 2 章

# 量子缠绕及其在量子信息和量子计算的应用

量子计算的概念是从 20 世纪 80 年代初出现的。1982 年 P. Benioff<sup>[1-3]</sup> 提出计算机在原则上可以用纯粹量子的方式运行。量子计算机会出错误, 纠错会有不少麻烦。既然如此, 它和经典计算机相比又有什么优越之处呢? 经典计算机能存储矢量并旋转它们, 将它们投影到正交基上, 等等。实际上它也可以模拟量子过程, 但当希尔伯特空间变得很大时, 模拟效率变得越低。1982 年费曼<sup>[4-5]</sup> 指出, 量子计算机模拟量子过程要容易得多, 因此可以完成某些经典计算机无法完成的任务。如果量子计算机有并行结构, 就可以实时模仿任何量子体系, 不论其大小如何。相形之下, 经典计算机模拟量子体系所需的步骤要随体系的大小和演化时间长短指数变化。特别是在 20 世纪 90 年代, 量子信息与量子计算有了迅速发展。本章将着重介绍与量子信息和量子计算关系密切的量子缠绕的基本性质, 也要介绍一些量子信息的基本概念。在量子信息与量子计算方面已有不少详细的评述文章和专著<sup>[6-9]</sup>, 本章内容参考最多的是 J. Preskill 的讲义<sup>[10]</sup>。

## 2.1 量子计算简介

### 2.1.1 量子数据和数据处理

经典比特用两个状态 0 和 1 代表。例如可以记为  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$ 。经典  $n$ -比特用一串  $n$  个比特代表, 每个比特可能是 0 或 1,  $n$ -比特总共有  $2^n$  个不同的状态, 从  $000\dots 0$  到  $111\dots 1$ 。量子比特 ( $q$  比特) 可以用两能级的微观体系实现, 例如原子、核自旋或光子极化。量子比特和经典比特特征最大的不同在于它可以是  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  状态,  $\alpha$  和  $\beta$  是复数并且满足  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ 。一对量子比特 ( $2-q$  比特) 可以是布尔 (Bool) 比特  $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle$  和  $|11\rangle$  四者之一, 也可能是它们的组合, 例如

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |01\rangle) = |0\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \quad (2.1.1)$$

这是一个直积态 (可分离为两个  $q$  比特的乘积)。下面的  $q$  比特则是不能表示为乘积的组合:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \quad (2.1.2)$$

它是不能分离的,称为“缠绕态”。一串  $n$ -量子比特( $n$ -q 比特)可以表示为

$$\psi = \sum_{x=(00\dots0)}^{(11\dots1)} c_x |x\rangle \quad (2.1.3)$$

此处  $c_x$  是复数,满足

$$\sum_x |c_x|^2 = 1 \quad (2.1.4)$$

$n$ -q 比特的量子态用  $2^n$  维希尔伯特空间的一个矢量代表,每一维都是一个经典状态。

经典计算可以表示为一系列的 1-比特和 2-比特操作,例如 NOT 门(非门)和 AND 门(与门)。1-比特操作的 NOT 门是状态的翻转,即  $0 \rightarrow 1, 1 \rightarrow 0$ 。作用于  $a$  和  $b$  的 AND 操作记为  $x = a \wedge b$ ,定义为仅当  $a, b$  都为 1 时  $x = 1$ ,否则  $x = 0$ 。量子计算也类似地表示为一系列的 1-q 比特和 2-q 比特量子门。1-q 比特状态表示为

$$\begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{pmatrix}$$

作用在它上面的量子门是幺正矩阵

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$$

它将  $|0\rangle$  映射为  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ ,将  $|1\rangle$  映射为  $\gamma|0\rangle + \delta|1\rangle$ 。布尔态  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  的经典对应是 0 和 1,但  $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  却没有经典对应。2-比特布尔态的第一个比特称为“控制输入”(controlled input),第二个比特称为“靶输入”(target input)。如果控制输入为 1,操作 CNOT (controlled NOT)将靶输入翻转;如果控制输入为 0,则不做任何事。它将  $|10\rangle$  变为  $|11\rangle$ ,将  $|11\rangle$  变为  $|10\rangle$ ,保持  $|00\rangle$  和  $|01\rangle$  不变。对 2-q 比特,有

$$\text{CNOT: } |a, b\rangle \rightarrow |a, a \oplus b\rangle \quad (2.1.5)$$

此处  $\oplus$  是模为 2 的加法。量子门 XOR(exclusive OR,异或门)定义为

$$U_{\text{XOR}} |x, 0\rangle = |x, x\rangle \quad (2.1.6)$$

它保持第 1 个 q 比特不变,而将第 2 个 q 比特改为第 1 个 q 比特的复制品。复制行为使人不禁要尝试一下,能否作用在典型量子比特  $|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  上将它克隆? 尝试的结果是

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \quad (2.1.7)$$

$$\begin{aligned} U_{\text{XOR}} |\psi, 0\rangle &= \alpha U_{\text{XOR}} |0, 0\rangle + \beta U_{\text{XOR}} |1, 0\rangle \\ &= \alpha |0, 0\rangle + \beta |1, 1\rangle \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

它不等于预期的  $|\psi, \psi\rangle$ ,而是一个纠缠态。这是对量子态普遍成立的“非克隆定理”的一个特例。我们将在 2.3.3 节讨论这个定理。

任何作用在量子数据上的幺正算符都可以由 2-q 比特操作 XOR 或 CNOT 以及 1-q 比特的幺正操作  $\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}$  构成。

## 2.1.2 量子并行性与有效量子算法

D. Deutsch<sup>[11]</sup>将费曼的想法表述为更具体的形式。从一个具体的例子开始。函数  $f(x)$  将一个 1-比特  $x$  变为另一个 1-比特  $f(x)$ 。我们想要判断一下,  $f(0)$  和  $f(1)$  是否相等。经典计算机要分别计算  $f(0)$  和  $f(1)$ ,然后比较它们做出判断。量子计算机能做得更好吗? 定义一个幺正变换  $U_f$ :

$$U_f : |x\rangle |y\rangle \rightarrow |x\rangle |y \oplus f(x)\rangle \quad (2.1.9)$$

如果  $f(x)=1$ , 它将第 2 个 q 比特翻转; 如果  $f(x)=0$ , 它就什么也不做。如果  $|y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ , 就有

$$\begin{aligned} U_f : |x\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) &\rightarrow |x\rangle \frac{1}{\sqrt{2}}(|f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle) \\ &= |x\rangle (-1)^{f(x)} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

在此结果中,  $f(x)$  已不再是状态的标志, 而是集中到相因子中了。令  $|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ , 有

$$U_f : \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [(-1)^{f(0)} |0\rangle + (-1)^{f(1)} |1\rangle] \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \quad (2.1.11)$$

将式(2.1.11)中右侧第 1 个 q 比特投影到基  $|\pm\rangle$  上:

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle) \quad (2.1.12)$$

结果是: 如果  $f(0)=f(1)$  就得到  $|+\rangle$ , 如果  $f(0) \neq f(1)$  则得到  $|-\rangle$ 。可以把量子计算机想象成一个黑匣子, 将 q 比特和操作输入, 它会进行计算, 然后把结果投影到基  $\{|0\rangle, |1\rangle\}$  上。如果投影给出  $\{1, 0\}$ , 则结果是 0; 如果投影给出  $\{0, 1\}$ , 则结果是 1。在这个例子中, 输入的 q 比特是  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ , 操作是  $U_f$ 。和通常不同的是, 投影的基是  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  的两个线性组合  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ 。如果投影给出  $\{1, 0\}$ , 则  $f(0)=f(1)$ ; 如果投影给出  $\{0, 1\}$ , 则  $f(0) \neq f(1)$ 。量子计算机完成计算只用了一步。这个算法由 I. L. Chuang 等人<sup>[12]</sup>实现。这是量子计算并行的一个例子, 称为“Deutsch 问题”。该算法抽出了与  $f(0)$  和  $f(1)$  都有关的整体信息。令  $f(x)$  为  $N$ -比特的函数, 有  $2^N$  个可能的宗量。如果用经典计算机计算  $f(x)$  的函数表, 则要进行  $2^N$  次计算。在  $N$  值很大时, 这是不可想象的。用量子计算机执行

$$U_f : |x\rangle |0\rangle \rightarrow |x\rangle |f(x)\rangle \quad (2.1.13)$$

输入以下状态

$$\left[ \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \right]^N = \frac{1}{2^{N/2}} \sum_{x=0}^{2^N-1} |x\rangle \quad (2.1.14)$$

运算  $U_f$  一次, 可以生成下列状态:

$$\frac{1}{2^{N/2}} \sum_{x=0}^{2^N-1} |x\rangle |f(x)\rangle \quad (2.1.15)$$

函数  $f$  的整体性质已经蕴藏在式(2.1.15)中了。巧妙地应用这个性质可以设计出强有力的算法。其中著名的有:

(1) 大数的因子化<sup>[13]</sup>。需要的时间是最好经典时间的对数多项式。指数式会加快是由于运用了一些并行计算路径的相消干涉。

(2) 在未分类的数据库中寻找一个对象<sup>[14]</sup>, 这被称为“在草堆中寻找一根针”。在  $N$  个外观相同的物体中要找一个特定的物体, 平均需要找  $N/2$  次才能有  $1/2$  成功的概率。如果

用缠绕的  $q$  比特,则每一次寻找都会影响下一个操作。这样经过  $\sqrt{N}$  次寻找就有  $1/2$  成功的机会。这个算法已经由 I. L. Chuang 等人<sup>[15]</sup>用核磁共振方法在实验上实现。但这个方法的缠绕性质仍在进一步探讨,量子计算的威力发挥也在进一步研究<sup>[16]</sup>。

(3) 量子模拟。解决多体问题,经典计算机所需时间随粒子数增加而指数上升。S. Wiesner<sup>[17]</sup>, D. Abrams 和 S. Lloyd<sup>[18]</sup>追随费曼的想法,即量子计算机模拟量子系统没有困难,因为它们遵守的定律是完全一样的。在量子计算机中,根据哈密顿量设计的么正变换作用于初态可以直接导致末态,不需要解薛定谔方程。这个办法远比在常规计算机上用数值方法解薛定谔方程和蒙特卡罗模拟优越。

### 2.1.3 量子信息

在讨论缠绕的量度、量子数据压缩等实际问题时,都需要涉及经典和量子信息的基础概念。在经典信息学中遇到的问题是:① 为了避免重复,一条信息可以压缩到什么程度;② 为了保护信息不被噪声带来的错误所破坏,需要多少冗余度(redundancy)。香农(Shannon)在 1948 年用熵的概念表征冗余度。考虑一条有  $n$  个字符的信息,  $n \gg 1$ , 每个字符都从二进制的数 1 和 0 选出,先验概率分别是  $p$  和  $1-p$ ,  $0 \leq p \leq 1$ 。问题是能否用短一些的字串表达出基本相同的信息内容。对  $n$  很大时,字串包含大约  $n(1-p)$  个 0 和  $np$  个 1。具有相同

数目的 0 与 1 的不同字串共有  $\binom{n}{np}$  个。从斯特林(Stirling)大数公式

$$\log n! = n \log n - n + O(\log n) \quad (2.1.16)$$

可得

$$\begin{aligned} \log \binom{n}{np} &= \log \frac{n!}{(np)! [n(1-p)]!} \\ &\simeq n \log n - n - [np \log np - np + n(1-p) \log n(1-p) - n(1-p)] \\ &= nH(p) \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

此处

$$H(p) = -p \log p - (1-p) \log(1-p) \quad (2.1.18)$$

称为“熵函数”。对数的底取为 2。这类字串(称为“典型字串”)的数目为  $2^{nH(p)}$  个。具有不同数目 0 和 1 的字串称为“非典型字串”,它们出现的概率在  $n \rightarrow \infty$  时微乎其微。因此,要传达在  $n$  位比特(0 或 1)字串中所携带的信息,选用一个框块编码(block code),赋予每一个典型字串以一个正整数就够了。这个编码有  $2^{nH(p)}$  个字符,因此我们将每一个字符用一个长度为  $nH(p)$  的字串表征即可。由于在  $0 \leq p \leq 1$  情况下有  $0 \leq H(p) \leq 1$ , 而仅在  $p = \frac{1}{2}$  时

$H(p) = 1$ 。框块编码在任何  $p \neq \frac{1}{2}$  的情况下将信息压缩。因此在  $p$  和  $\frac{1}{2}$  相差很多时,可以得到程度相当大的压缩。以上的推论可以从两种字符推广到  $k$  种字符的字符集,字符  $x$  出现的概率是  $p(x)$ 。有  $n$  个字符的字串,  $x$  出现的概率是  $np(x)$ , 典型字串的数目是

$$\frac{n!}{\prod_x (np(x))!} \simeq 2^{nH(x)} \quad (2.1.19)$$

此处

$$H(X) = \sum_x -p(x) \log p(x) \quad (2.1.20)$$

是字符系综  $X = \{x, p(x)\}$  的香农熵。这个系综中一个字符  $x$  平均携带信息  $H(x)$ 。可以用  $\{\epsilon, \delta\}$  表述把以上的推论变得更加明确。一个特定的  $n$  字符信息  $x_1 x_2 \cdots x_n$  出现的先验概率为

$$\begin{aligned} p(x_1 \cdots x_n) &= p(x_1) \cdots p(x_n) \\ \log p(x_1 \cdots x_n) &= \sum_{i=1}^n \log p(x_i) \end{aligned} \quad (2.1.21)$$

中央极限定理给出

$$-\frac{1}{n} \log p(x_1 \cdots x_n) \sim \langle -\log p(x) \rangle \equiv \frac{\sum_x -p(x) \log p(x)}{\sum_x p(x)} = H(X) \quad (2.1.22)$$

对于任何  $\epsilon, \delta > 0$  和  $x$  足够大, 每个典型字串的概率  $P$  满足

$$H(X) - \delta < -\frac{1}{n} \log p(x_1 \cdots x_n) < H(X) + \delta \quad (2.1.23)$$

所有典型字串的总概率超过  $1 - \epsilon$ 。香农的无噪声编码定理判定最佳编码能渐近地将每个字符压缩到  $H(x)$  比特。

当信息传输通过有噪声的通道时, 收到信息中的  $y$  可能与送出信息中的  $x$  不同。噪声通道由条件概率  $p(y|x)$  表征, 它代表送出  $x$  而收到  $y$  的概率。对所有可能送出的  $x$ , 接收到  $y$  的概率是:

$$p(y) = \sum_x p(y|x) p(x) \quad (2.1.24)$$

在  $y$  被接收之后,  $x$  的概率分布被刷新, 根据贝叶斯法则 (Bayes' theorem)

$$p(x|y) = \frac{p(y|x) p(x)}{p(y)} \quad (2.1.25)$$

刷新后的  $x$  分布不再是先验的了, 它包括了在收到  $y$  之后的有关  $x$  的知识。替代原有的熵函数, 现在是条件熵:

$$H(X|Y) = \langle -\log p(x|y) \rangle \quad (2.1.26)$$

它量化了用最佳编码时每个字符所携带的信息。联合概率由下式给出:

$$p(x, y) = p(x|y) p(y) = p(y|x) p(x) \quad (2.1.27)$$

由此,  $H(X|Y)$  变为

$$H(X|Y) = \langle -\log p(x|y) \rangle = \langle -\log p(x, y) \rangle - H(y) \quad (2.1.28)$$

从另一方面看

$$H(Y|X) = \langle -\log p(y|x) \rangle = \langle -\log p(x, y) \rangle - H(x) \quad (2.1.29)$$

由于知道了  $Y$ , 我们增获了有关  $X$  的信息。要量化这个概念, 在知道  $Y$  以后, 表明  $X$  所需的每字符比特数的减少量:

$$\begin{aligned} I(X; Y) &\equiv H(X) - H(X|Y) = H(Y) - H(Y|X) \\ &= H(X) + H(Y) - H(X, Y) \end{aligned} \quad (2.1.30)$$

它被称为“相互信息”(mutual information), 对  $X$  和  $Y$  是对称的。可以证明

$$H(X) \geq H(X|Y) \geq 0$$

因此  $I$  是非负的。 $I(X; Y)$  是当我们获取了  $Y$  之后增获的关于  $X$  的每字符的信息量, 反之亦然。如果  $p(y|x)$  表征一个噪声通道,  $I(X; Y)$  就是在给定先验概率分布  $p(x)$  条件下每个字符的信息量。这就是香农的噪声通道编码定理。当  $X$  与  $Y$  没有关联时, 有  $p(x, y) = p(x)p(y)$ , 因而  $I(X; Y) = 0$ , 即获取  $Y$  对于了解和它没有关联的  $X$  毫无帮助。

上述的考虑可以推广到量子信息。量子状态的系综是制备包含  $n$  个字符信息的源。每个字符由密度矩阵  $\rho_x$  表征, 先验概率为  $p_x$ 。系综的密度矩阵为

$$\rho = \sum_x p_x \rho_x \quad (2.1.31)$$

它的冯纽曼熵(von Neumann entropy)定义为

$$S(\rho) = -\text{tr}(\rho \log \rho) \quad (2.1.32)$$

如选择了使  $\rho$  对角化的正交归一基  $\{|a\rangle\}$ , 则有

$$\rho = \sum_a \lambda_a |a\rangle\langle a| \quad (2.1.33)$$

以及

$$S(\rho) = \sum_a -\lambda_a \log \lambda_a = H(A) \quad (2.1.34)$$

此处  $H$  是系综  $A\{a, \lambda_a\}$  的熵函数。

当  $x$  包含相互正交的纯态时, 量子源还原为经典源,  $S(\rho) = H(x)$ 。若状态  $\rho_x$  不再是相互对易的, 则量子源变为非平庸的。冯纽曼熵起双重作用, 它既量化量子信息内容, 即可靠地编码信息所需的最小每字符信息量, 也量化经典信息内容, 即在进行最好的测量时能获取的有关制备的最大每字符信息量(比特)。约化密度矩阵的冯纽曼熵也表征二组分纯态的缠绕度。

## 2.2 量子缠绕

在讨论贝尔定理时我们见到了 EPR-Bell 态。下文将在量子信息和量子计算的应用方面, 进一步剖析它们的性质。

### 2.2.1 缠绕态的密度矩阵表征

考虑一个包含子体系  $A$  与  $B$  的体系, 由关联波函数描述:

$$|\psi\rangle = a |0\rangle_A \otimes |0\rangle_B + b |1\rangle_A \otimes |1\rangle_B \quad (2.2.1)$$

此处  $|0\rangle$  与  $|1\rangle$  是正交的。对  $A$  进行力学量  $M_A$  的测量。对整个体系而言, 它的算符是  $M_A \otimes 1_B$ , 它在状态  $|\psi\rangle$  中的期望值是

$$\begin{aligned} \langle \psi | M_A \otimes 1_B | \psi \rangle &= (a_A^* \langle 0 | \otimes_B \langle 0 | + b_A^* \langle 1 | \otimes_B \langle 1 |) \\ &\quad (M_A \otimes 1_B) (a | 0 \rangle_A \otimes | 0 \rangle_B + b | 1 \rangle_A \otimes | 1 \rangle_B) \\ &= |a|^2 \langle 0 | M_A | 0 \rangle_A + |b|^2 \langle 1 | M_A | 1 \rangle_A \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

此处用了正交性

$${}_B \langle 0 | 1_B | 1 \rangle_B = 0 \quad (2.2.3)$$

关系式(2.2.2)可以用密度矩阵  $\rho_A$  表示:

$$\langle M_A \rangle = \text{tr}(M_A \rho_A) \quad (2.2.4)$$

$$\rho_A = |a|^2 |0\rangle_{AA} \langle 0| + |b|^2 |1\rangle_{AA} \langle 1| \quad (2.2.5)$$

上面的例子可以推广到任何两组分体系的任意状态,它的希尔伯特空间是  $H_A \otimes H_B$ 。体系的任何纯态可以展开为

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_{i,\mu} a_{i\mu} |i\rangle_A \otimes |\mu\rangle_B \quad (2.2.6)$$

并有

$$\sum_{i\mu} |a_{i\mu}|^2 = 1 \quad (2.2.7)$$

$M_A$  的期望值是

$$\begin{aligned} \langle M_A \rangle &= {}_{AB} \langle \psi | M_A \otimes 1_B | \psi \rangle_{AB} \\ &= \sum_{j\nu} a_{j\nu}^* \langle j | \otimes \langle \nu | \rangle (M_A \otimes 1_B) \sum_{i\mu} a_{i\mu} (|i\rangle_A \otimes |\mu\rangle_B) \\ &= \sum_{ij\nu} a_{j\nu}^* a_{i\nu} \langle j | M_A | i \rangle_A \\ &= \text{tr}(M_A \rho_A) \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

此处<sup>①</sup>

$$\rho_A = \text{tr}_B |\psi\rangle_{AB} {}_{AB} \langle \psi| = \sum_{ij\mu} a_{i\mu} a_{j\mu}^* |i\rangle_A \langle j| \quad (2.2.9)$$

$\rho_A$  可以对角化,它的本征值是非负的,本征值之和为 1:

$$\text{tr} \rho_A = \sum_{i\mu} |a_{i\mu}|^2 = 1 \quad (2.2.10)$$

令  $\{\varphi_\alpha\}$  代表将  $\rho_A$  对角化的基,有

$$\rho_A = \sum_\alpha p_\alpha |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha| \quad (2.2.11)$$

此处  $0 < p_\alpha \leq 1$ ,  $\sum_\alpha p_\alpha = 1$ 。如果  $\rho_A$  只有一个非零的本征值,使  $\rho_A^2 = \rho_A$ , 即  $\rho_A$  代表的是纯态。否则  $\text{tr} \rho_A^2 < \text{tr} \rho_A$ , 状态是混合态,它包含态  $\varphi_\alpha$  的非相干组合,  $p_\alpha \neq 0$ 。体系的纯态  $|\psi\rangle_{AB}$  并不一定意味着子体系 A 也是纯态。只有在无相互作用子体系直乘态  $|\psi\rangle_{AB} = |\varphi\rangle_A \otimes |\chi\rangle_B$  的情况下才会如此。当子体系 A 与子体系 B 相互作用时,它们相互关联,或称“缠绕”,这就是在式(2.2.6)中遇到的情况。即使相互作用只短暂存在,缠绕也摧毁了子体系 A 状态间叠加的相干性,使在对子体系 A 进行测量时,某些相对相位不能被测出。对二能级体系  $(|0\rangle, |1\rangle)$ ,  $2 \times 2$  密度矩阵可以用泡利矩阵(Pauli matrix)和单位矩阵表示:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{P}) &= \frac{1}{2}(\mathbf{I} + \mathbf{P} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_3 & P_1 - iP_2 \\ P_1 + iP_2 & 1 - P_3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

由于泡利矩阵是无迹的,  $\text{tr} \rho = 1$  的要求得以满足。从式(2.2.12)可以得到

$$\det \rho = \frac{1}{4}(1 - \mathbf{P}^2) \quad (2.2.13)$$

令  $\rho$  的本征值为  $p_1$  和  $p_2$ , 由此  $\det \rho = p_1 p_2$ 。  $\rho$  具有非负本征值的必要条件是  $\mathbf{P}^2 \leq 1$ 。这也是充分条件,因为  $\text{tr} \rho = p_1 + p_2$  意味着  $p_1$  和  $p_2$  不可能都为负值。此时  $\det \rho \geq 0$  就决定了

<sup>①</sup>  $\text{tr} |i\rangle \langle j| = \sum_k \langle k | i \rangle \langle j | k \rangle = \sum_k \langle j | k \rangle \langle k | i \rangle = \langle j | i \rangle$

$p_1$  和  $p_2$  为非负。在  $0 \leq |\mathbf{P}| \leq 1$  条件下的矢量  $\mathbf{P}$  的端点必须在半径为 1 的球内或球面上。这个球称为“布洛赫球” (Bloch ball)。在球面上的点  $|\mathbf{P}|=1$ , 即  $\det \rho = 0$ ,  $\rho$  的本征值为 0 和 1, 它表征一个纯态。 $\rho$  由单位矢量  $\hat{\mathbf{n}} = (\sin\theta \cos\varphi, \sin\theta \sin\varphi, \cos\theta)$  给出:

$$\rho(\hat{\mathbf{n}}) = \frac{1}{2}(\mathbf{I} + \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \quad (2.2.14)$$

$\rho(\hat{\mathbf{n}})$  满足关系

$$(\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \rho(\hat{\mathbf{n}}) = \rho(\hat{\mathbf{n}}) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \rho(\hat{\mathbf{n}}) \quad (2.2.15)$$

即  $\rho(\hat{\mathbf{n}})$  是  $\hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}$  的本征态, 本征值为 1。它可以被诠释为指向  $\hat{\mathbf{n}}(\theta, \varphi)$  方向的自旋。这个态由以下本征自旋量表示:

$$|\psi(\theta, \varphi)\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi/2} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (2.2.16)$$

这可以直接由计算验证:

$$\begin{aligned} \rho(\hat{\mathbf{n}}) &= |\psi(\theta, \varphi)\rangle \langle \psi(\theta, \varphi)| \\ &= \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} & \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{I} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}(\mathbf{I} + \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \end{aligned} \quad (2.2.17)$$

### 2.2.2 施密特分解

二组分纯态可以表示为如式 (2.2.6) 所示的标准形式, 即施密特分解 (Schmidt decomposition):

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_{i\mu} a_{i\mu} |i\rangle_A |\mu\rangle_B \quad (2.2.18)$$

定义另一组基:

$$|\tilde{i}\rangle_B = \sum_{\mu} a_{i\mu} |\mu\rangle_B \quad (2.2.19)$$

它不一定是正交归一的。因此

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_i |i\rangle_A |\tilde{i}\rangle_B \quad (2.2.20)$$

此处  $\tilde{i}$  与式中的求和指标  $i$  有一一对应关系。假设基  $\{|i\rangle_A\}$  使  $\rho_A$  对角化:

$$\rho_A = \sum_i p_i |i\rangle_{AA} \langle i| \quad (2.2.21)$$

则可以对 B 取迹得到  $\rho_A$ :

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{tr}_B(|\psi\rangle_{AB} \langle \psi|) \\ &= \text{tr}_B\left(\sum_{ij} |i\rangle_{AA} \langle j| \otimes |\tilde{i}\rangle_{BB} \langle \tilde{j}| \right) \\ &= \sum_{ij} \langle \tilde{j}| \tilde{i}\rangle_B (|i\rangle_{AA} \langle i|) \end{aligned} \quad (2.2.22)$$

比较式(2.2.21)与式(2.2.22)得到

$${}_B\langle \tilde{j} | \tilde{i} \rangle_B = p_i \delta_{ij} \quad (2.2.23)$$

基 $\{|\tilde{i}\rangle_B\}$ 是正交的,但未归一。定义

$$|i'\rangle_B = \sqrt{p_i} |\tilde{i}\rangle_B \quad (2.2.24)$$

使基 $\{|i'\rangle_B\}$ 正交归一,就得到施密特分解的标准形式:

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_i p_i |i\rangle_A |i'\rangle_B \quad (2.2.25)$$

系数 $\{\sqrt{p_i}\}$ 称为“施密特系数”,而 $\rho_A$ 与 $\rho_B$ 非零本征值的数目称为“施密特数”。

一般来说,两个不同的纯态 $|\psi\rangle_{AB}$ 和 $|\varphi\rangle_{AB}$ 不能用 $\mathcal{H}_A$ 与 $\mathcal{H}_B$ 的相同正交归一化基来展开。从式(2.2.23)开始,对 A 取迹,得到

$$\rho_B = \text{tr}_A |\psi\rangle_{AB} \langle \psi| = \sum_i p_i |i'\rangle_{BB} \langle i'| \quad (2.2.26)$$

可以看到 $\rho_A$ 与 $\rho_B$ 共享相同的非零本征值。因为 $\mathcal{H}_A$ 与 $\mathcal{H}_B$ 可以有不同的维数,它们的零本征值数可能不同。如果 $\rho_A$ 与 $\rho_B$ 在 0 之外没有简并的本征值, $|\psi\rangle_{AB}$ 的施密特分解就唯一地确定了。我们可以把 $\rho_A$ 与 $\rho_B$ 对角化以找出 $|i\rangle_A$ 和 $|i'\rangle_B$ ,把它们配起对来求和再乘以 $p_i$ ,求和之后就得到了 $|\psi\rangle_{AB}$ (精确到共同相位)。

暂时回到 EPR 佯谬。爱因斯坦等三人的反对意见之一就是 B 的  $s_z$  测量得到 $|\uparrow_z\rangle_B$ 造成的状态塌缩瞬间给 A 传递了信息,使对 A 的即刻测量唯一地得到 $|\downarrow_z\rangle_A$ 。爱因斯坦等三人将它诠释为超距的相互作用。考虑总自旋为 1 的态

$$|\psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_z\rangle_A |\uparrow_z\rangle_B + |\downarrow_z\rangle_A |\downarrow_z\rangle_B) \quad (2.2.27)$$

对 B 的测量导致在系综中对 A 自旋的制备:

$$\rho_A = \frac{1}{2} |\uparrow_z\rangle_{AA} \langle \uparrow_z| + \frac{1}{2} |\downarrow_z\rangle_{AA} \langle \downarrow_z| \quad (2.2.28)$$

它有非零的简并本征态,因此式(2.2.27)的施密特分解不是唯一的。另一个分解

$$|\psi\rangle_{AB} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_x\rangle_A |\uparrow_x\rangle_B + |\downarrow_x\rangle_A |\downarrow_x\rangle_B) \quad (2.2.29)$$

与式(2.2.29)的不同之处在于 $\mathcal{H}_A$ 与 $\mathcal{H}_B$ 基的选择不同。式(2.2.27)与式(2.2.29)描述了相同的状态,即自旋为 1 的二组分缠绕态,区别在于自旋量子化轴的不同。在对 $|\cdot\rangle_A$ 与 $|\cdot\rangle_B$ 同时进行么正变换时,它们彼此转化。对 B 进行  $s_x$  的测量在系综中制备自旋态 $\{|\uparrow_x\rangle_A |\uparrow_x\rangle_B\}$ ;对 A 进行  $s_x$  测量导致同样的密度矩阵式(2.2.28)。因此对 A 运行  $s_z$  测量并不能显现对 B 的测量所发出的信息,即对 B 测量的量子化轴可以在任何方向。这个性质将结合量子密钥分布问题进一步讨论。

施密特数用来表征两组分纯态的缠绕。在 $\mathcal{H}_A$ 与 $\mathcal{H}_B$ 中纯态的直积是可分离的二组分纯态

$$|\psi\rangle_{AB} = |\varphi\rangle_A \otimes |\chi\rangle_B \quad (2.2.30)$$

这个态的施密特数是 1。对任何施密特数大于 1 的态,不能表示为这种形式,因为它是缠绕的。

最后提一下,两个可分辨粒子体系的缠绕是可以确切定义的,它的性质也充分研讨过。

对两个不可分辨粒子,其性质是非平庸的。J. Schliemann 等人<sup>[19-20]</sup>讨论了二费密子体系的缠绕,发现可以把可分辨二粒子体系的结果移植过来。对二玻色子体系的研究有不同方法的结果报告<sup>[21-22]</sup>。

### 2.2.3 EPR-Bell 态的进一步讨论

在 1.3 节中讨论过 EPR-Bell 态,用 q 比特语言表示:

$$\begin{aligned} |\phi^\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle \pm |11\rangle), \\ |\psi^\pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle \pm |10\rangle) \end{aligned} \quad (2.2.31)$$

它们是“最大限度的缠绕态”,意思是对 q 比特 B 取迹导致

$$\rho_A = \text{tr}_B(|\phi^\pm\rangle_{AB}\langle\phi^\pm|) = \frac{1}{2}\mathbf{I}_A \quad (2.2.32)$$

类似地,对 A 取迹导致 $\rho_B = \frac{1}{2}\mathbf{I}_B$ 。即如果对自旋 A 在任何轴方向进行测量,导致自旋 B 的结果完全随机,向上和向下为 1/2 的等概率。在这样的缠绕态中,两个 q 比特的信息不能通过对 A 或 B 的定域测量获得。

缠绕态(2.2.31)是两个相互对易的算符 $\sigma_1^{(A)}\sigma_1^{(B)}$ 和 $\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)}$ 的同时本征态。 $\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)}$ 的本征态被称为“宇称比特”(自旋平行或者反平行), $\sigma_1^{(A)}\sigma_1^{(B)}$ 的本征态被称为“相比特”(在叠加时取+或-)。每个状态携带的比特信息由表 2.1 给出。

表 2.1 EPR-Bell 态的宇称比特和相比特

状态	宇称比特	相比特
$\phi^+$	+	+
$\phi^-$	+	-
$\psi^+$	-	+
$\psi^-$	-	-

信息的发信人和收信人相距很远。他们各自分享一个缠绕比特的一个组分,每个人分别对在 A 处或 B 处的信息通过么正变换进行操作。例如 Alice 对在 A 处的 q 比特作用以 $\sigma_3$ ,将 $|0\rangle_A$ 和 $|1\rangle_A$ 的相对相位翻转,得到以下变化:

$$\begin{aligned} |\phi^+\rangle &\leftrightarrow |\phi^-\rangle, \\ |\psi^+\rangle &\leftrightarrow |\psi^-\rangle \end{aligned} \quad (2.2.33)$$

她也可以对 q 比特作用以 $\sigma_1$ ,将自旋翻转 $|0\rangle_A \leftrightarrow |1\rangle_A$ ,得到以下变化:

$$\begin{aligned} |\phi^+\rangle &\leftrightarrow |\psi^+\rangle, \\ |\phi^-\rangle &\leftrightarrow |\psi^-\rangle \end{aligned} \quad (2.2.34)$$

这类定域么正变换将一个缠绕态变为另外一个。Bob 也可以对 B 处的 q 比特作类似的变换。在变换过程中 $\rho_A = \rho_B = \frac{1}{2}\mathbf{I}$ 不变化,即存储于任一个 EPR-Bell 态的信息不可能由局域操作来获得,即使 Alice 和 Bob 可以对他们的测量结果进行经典信息的交换,了解他们测量结果的关联。设他们都测量了 $\sigma_3$ 。因为 $\sigma_3^{(A)}$ 和 $\sigma_3^{(B)}$ 都和算符 $\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)}$ 对易,测量不干扰宇

称比特,将测量结果合在一起就得到了宇称比特。另外的选择是测量  $\sigma_1^{(A)}$  和  $\sigma_1^{(B)}$ ,他们获得了相比特的信息,代价是干扰了宇称比特。如果不去分别获得  $\sigma_3^{(A)}$  和  $\sigma_3^{(B)}$  的信息,只需测量乘积  $\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)}$ ,就可以不干扰  $\sigma_1^{(A)}\sigma_1^{(B)}$ 。这不能由定域的操作得到,而必须通过二人的共同努力。定义单 q 比特变换为哈达玛变换(Hadamard transform):

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_1 + \sigma_3) \quad (2.2.35)$$

它具有以下性质:

$$\begin{aligned} H^2 &= I \\ \begin{cases} H\sigma_1H = \sigma_3 \\ H\sigma_3H = \sigma_1 \end{cases} \end{aligned} \quad (2.2.36)$$

在布洛赫球语言中,它代表绕轴  $\hat{n} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{n}_1 + \hat{n}_3)$  转  $\theta = \pi$  角。它将  $\hat{z}$  转到  $\hat{x}$ ,  $\hat{x}$  转到  $\hat{z}$ :

$$R(\hat{n}, \theta) = \cos \frac{\theta}{2} + i\hat{n} \cdot \sigma \sin \frac{\theta}{2} \xrightarrow{\theta = \pi} i \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_1 + \sigma_3) = iH \quad (2.2.37)$$

我们还需要在 2.1.1 节中引入的 2-q 比特操作 CNOT:

$$\text{CNOT: } |a, b\rangle \rightarrow |a, a \oplus b\rangle \quad (2.2.38)$$

$$(\text{CNOT})^2 = 1 \quad (2.2.39)$$

它在量子电路图解中(图 2.1)为

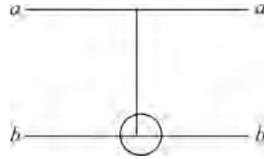


图 2.1 CNOT 图解

把这两种操作组合起来,就有以下图解(图 2.2):

意思是将  $H$  用于 q 比特  $a$ ,再将 CNOT 用于其结果。作用于布尔态,联合变换导致 EPR-Bell 态<sup>①</sup>

$$|00\rangle \xrightarrow{H} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) |0\rangle \xrightarrow{\text{CNOT}} |\phi^+\rangle$$

$$|01\rangle \xrightarrow{H} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) |1\rangle \xrightarrow{\text{CNOT}} |\psi^+\rangle$$

$$|10\rangle \xrightarrow{H} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) |0\rangle \xrightarrow{\text{CNOT}} |\phi^-\rangle$$

$$|11\rangle \xrightarrow{H} \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) |1\rangle \xrightarrow{\text{CNOT}} |\psi^-\rangle$$

(2.2.40)

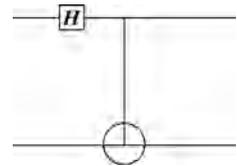


图 2.2  $H$  与 CNOT 组合图解

<sup>①</sup> 直接计算可以得到  $H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$ ,

$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ 。

以上操作的逆将 EPR-Bell 变回布尔基各态。注意 CNOT 态是非定域操作,它对靶比特的作用取决于控制比特。现在可以对布尔态进行测量,结果显示原始两个 EPR-Bell 态的两个 q 比特。

## 2.3 缠绕在量子信息学的应用

在 2.1.3 节中给出过一些例子,利用缠绕态完成经典计算很困难,甚至不可能完成。本节将详细讨论缠绕这个量子力学的基础概念在量子信息方面的一些应用。

### 2.3.1 致密编码

我们用以下的例子说明,传送量子比特比传送经典比特更为有利。Alice 可以制备  $|\uparrow_z\rangle$  和  $|\downarrow_z\rangle$ , Bob 可以通过测量判断她的选择。但实际上, Alice 可以利用缠绕态进行更有效的信息传递。她自己保留一个 q 比特,把缠绕态的另一个 q 比特传给 Bob。他们保留着各自分享的缠绕对就可以传递简短的信息。Alice 可以在她的 q 比特上进行下列变换之一。

- (1) 全同变换: 1。
- (2) 绕  $\hat{x}$  旋转  $\pi$ :  $e^{i\sigma_1\pi/2} = i\sigma_1$ 。
- (3) 绕  $\hat{y}$  旋转  $\pi$ :  $e^{i\sigma_2\pi/2} = i\sigma_2$ 。
- (4) 绕  $\hat{z}$  旋转  $\pi$ :  $e^{i\sigma_3\pi/2} = i\sigma_3$ 。

这些变换作用于  $|\phi^+\rangle_{AB}$  分别导致  $|\phi^+\rangle_{AB}$ ,  $|\psi^+\rangle_{AB}$ ,  $|\psi^-\rangle_{AB}$ ,  $|\phi^-\rangle_{AB}$  各态。每个态携带两个 q 比特信息(宇称比特和相比特)。Alice 可以根据所需结果态的宇称比特和相比特(这就是她要传给 Bob 的信息)选择她的操作。她对自己的 q 比特进行操作并将操作后的 q 比特传给 Bob。接收到 q 比特后, Bob 就对现在他所有的一对 q 比特执行正交测量  $\sigma_1^{(A)}\sigma_1^{(B)}$  和  $\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)}$ , 确定这一对的宇称比特和相比特。在此行动中, Alice 送出一个 q 比特,而 Bob 获得了两个 q 比特,这是经典信息学做不到的。通信的效率取决于应用事先存储的缠绕态。致密编码由 Innsbruck 研究组<sup>[23-24]</sup>实现。

### 2.3.2 量子密码学, EPR 量子钥分布

Alice 和 Bob 的通信是高度保密的。为了避免被窃听,他们要用只有他们二人才知道的密钥,这样才能对信息编码和解码。但如何才能使密钥绝对安全呢? 最好的办法是在通信时才建立密钥,而且只使用一次。这种密钥首先由 C. H. Bennett 和 G. Brassard<sup>[25]</sup>用光子极化实现,未涉及缠绕。此后的协议都是利用量子缠绕的。设 Alice 和 Bob 分享一系列缠绕对,每一对都制备为  $|\psi^-\rangle$  态。他们达成一个协议以建立密钥。对共同享有的每一对 q 比特,每个人自己决定是测量  $\sigma_1$  还是  $\sigma_3$ 。对于每一对 q 比特,这个选择是随意的。每次测量后他们公开宣布自己的选择,但不公开测量的结果。如果他们选择测量的可观测量不同,就弃置这对 q 比特不用,因为结果是不相关的。当他们所选的可观测量相同时,他们的结果是反关联的,但也是随机的。这就建立了密钥,任何窃听者对此都是不了解的。即使窃听者能够接触到二人共享的某些 q 比特对,协议也是安全的。当窃听者接触到一个 q 比特对时,这对 q 比特便不再处于  $|\psi^-\rangle$  态,而是和窃听者的 q 比特缠绕起来了。在 Alice 和 Bob 宣布

所测的可观测量时,窃听者便可以测量自己的 q 比特以获得 Alice 和 Bob 测量的结果。他能够如愿以偿吗? 最普遍的 AB 对和窃听者的 q 比特(E)的状态是:

$$|\gamma\rangle_{ABE} = |00\rangle_{AB} |e_{00}\rangle_E + |01\rangle_{AB} |e_{01}\rangle_E + |10\rangle_{AB} |e_{10}\rangle_E + |11\rangle_{AB} |e_{11}\rangle_E \quad (2.3.1)$$

因为 $|\psi^-\rangle$ 是 $\sigma_1^{(A)}\sigma_1^{(B)}$ 和 $\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)}$ 的本征态,Alice 和 Bob 可以验证他们所共享的这些 q 比特是否仍保持这个性质。他们牺牲一部分共享 q 比特所掌握的密钥来进行安全检查。如果测量的结果是肯定的,即 q 比特具有负的宇称比特和相比特,式(2.3.1)必须满足的要求是:

(1) 为了 $\sigma_1^{(A)}\sigma_1^{(B)} = -1$ ,它必须是

$$|\gamma\rangle_{ABE} = |01\rangle_{AB} |e_{01}\rangle_E + |10\rangle_{AB} |e_{10}\rangle_E \quad (2.3.2)$$

(2) 为了 $\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)} = -1$ ,它必须是

$$|\gamma\rangle_{ABE} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) |e\rangle_E \quad (2.3.3)$$

此处

$$\frac{1}{\sqrt{2}} |e\rangle_E \equiv |e_{10}\rangle_E = -|e_{01}\rangle_E \quad (2.3.4)$$

$\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)} = -1$ 的要求产生了式(2.3.3),即 AB 对和 E 没有缠绕,窃听者就不可能通过测量自己的 q 比特了解到 Alice 和 Bob 的测量结果。检查获得的肯定结果使 Alice 和 Bob 可以确信密钥是安全的。如果窃听者得以把他的 q 比特和 Alice/Bob 的 q 比特对缠绕起来,检查的结果就是否定的,即 $\sigma_3^{(A)}\sigma_3^{(B)} \neq -1$ ,Alice 和 Bob 就发现了窃听活动,就可以放弃密钥而建立新的。以上的协议是主题<sup>[26-27]</sup>,同时也有主题的“变奏<sup>①</sup>”。协议<sup>[26-27]</sup>由 Innsbruck 研究组实现<sup>[28]</sup>。在这个实现中 Alice 和 Bob 采用协议<sup>[25]</sup>建立 49984 比特密钥。Alice 通过 XOR 操作用密钥对图像加密,并通过计算机网络传给 Bob。Bob 用密钥对图像解密。解密后的图像仅有极少数错误(来自密钥中的比特错误),结果示于图 2.3。

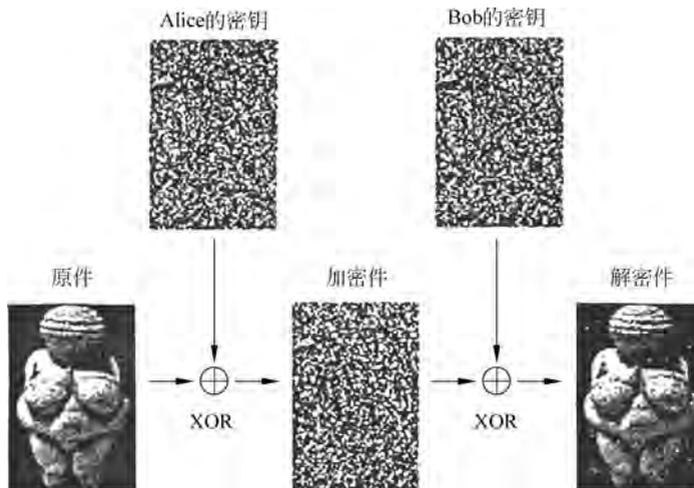


图 2.3 Willendorf 的维纳斯肖像(存于维也纳自然历史博物馆)的安全传送

取自文献<sup>[28]</sup>

① 见文献<sup>[10]</sup>的 4.2 节。

### 2.3.3 量子非克隆定理

一个聪明的窃听者本来可以不加干扰地复制 Alice 和 Bob 密钥的 q 比特,通过对复制品的测量获得他们的密钥。但量子密钥是受保护的,因为要想在没有干扰的条件下获得区别非正交量子态的信息是不可能的。令  $|\psi\rangle$  和  $|\varphi\rangle$  代表在 AB 的希尔伯特空间中的两个非正交态,  $\langle\psi|\varphi\rangle\neq 0$ 。窃听者想要通过执行幺正变换将它们复制:

$$\left. \begin{aligned} |\psi\rangle\otimes|0\rangle_E &\rightarrow|\psi\rangle\otimes|i\rangle_E \\ |\varphi\rangle\otimes|0\rangle_E &\rightarrow|\varphi\rangle\otimes|j\rangle_E \end{aligned} \right\} \quad (2.3.5)$$

幺正性意味着

$$\begin{aligned} \langle\psi|\varphi\rangle &= {}_E\langle 0|\otimes\langle\psi|)(|\varphi\rangle\otimes|0\rangle_E) \\ &= {}_E\langle i|\otimes\langle\psi|)(|\varphi\rangle\otimes|j\rangle_E) \\ &= \langle\psi|\varphi\rangle_E\langle i|j\rangle_E \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

对  $\langle\psi|\varphi\rangle\neq 0$ , 有  ${}_E\langle i|j\rangle_E=1$ , 即  $|i\rangle=|j\rangle$ 。窃听者对于  $|\psi\rangle$  和  $|\varphi\rangle$  得到同样的复制件,因此他不能区别非正交态。如果  $|\psi\rangle$  和  $|\varphi\rangle$  正交,情况就不同了。正交态  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  在原则上和经典比特一样不能免于在不被干扰的情况下被复制。幺正变换的作用如下:

$$\begin{aligned} U: |0\rangle_A|0\rangle_E &\rightarrow|0\rangle_A|0\rangle_E \\ |1\rangle_A|0\rangle_E &\rightarrow|1\rangle_A|1\rangle_E \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

它将在 A 处的状态复制到 E 处。但如果在 A 处的是一个一般的 q 比特

$$|\varphi\rangle_A = a|0\rangle_A + b|1\rangle_A \quad (2.3.8)$$

就有

$$\begin{aligned} U: (a|0\rangle_A + b|1\rangle_A)|0\rangle_E \\ \rightarrow a|0\rangle_A|0\rangle_E + b|1\rangle_A|1\rangle_E \end{aligned} \quad (2.3.9)$$

它和原件与复制件的直积  $|\varphi\rangle_A|\varphi\rangle_E$  不同。因此对于一个一般的 q 比特,如果它和  $|0\rangle$  或  $|1\rangle$  不正交,就不能被复制。我们还可以将条件再放松一些。在原有的希尔伯特空间  $\mathcal{H}_A$ (原件)  $\otimes$   $\mathcal{H}_E$ (复制件) 的基础上再包括一个辅助的  $\mathcal{H}_F$ , 并定义最普遍的复制幺正变换:

$$\begin{aligned} U: |\psi\rangle_A|0\rangle_E|0\rangle_F &\rightarrow|\psi\rangle_A|\psi\rangle_E|i\rangle_F \\ |\varphi\rangle_A|0\rangle_E|0\rangle_F &\rightarrow|\varphi\rangle_A|\varphi\rangle_E|j\rangle_F \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

此处  $|\psi\rangle$  和  $|\varphi\rangle$  是不同的两个非正交态。幺正变换给出:

$${}_A\langle\psi|\varphi\rangle_A = {}_A\langle\psi|\varphi\rangle_{AE}\langle\psi|\varphi\rangle_{EF}\langle i|j\rangle_F$$

即

$$1 = {}_E\langle\psi|\varphi\rangle_{EE}\langle i|j\rangle_F$$

对归一化的态有

$$\langle\psi|\varphi\rangle = 1 \quad (2.3.11)$$

意思是  $|\psi\rangle$  和  $|\varphi\rangle$  代表同一个射线态(只相差一个相因子的波函数)。没有任何一个幺正变换能同时复制两个有区别的、非正交的态。这就是量子非克隆定理。

### 2.3.4 量子远程传态

考虑一个奇特的处境。Alice 有一个 q 比特,但她却不知道它的状态。Bob 却需要这样

一个状态为他所用。二人之间有经典通道,此外他们还共享一个处于  $|\phi^+\rangle_{AB}$  态的缠绕对。这个缠绕对可以根据以下协议帮助他们完成愿望。Alice 对她的未知状态(记为  $|\chi\rangle_C$ )以及她分享的缠绕态的一个 q 比特进行 2.2.3 节描述的贝尔测量,从而把它们投影到 4 个 EPR-Bell 态  $|\phi^\pm\rangle_{CA}, |\psi^\pm\rangle_{CA}$  的其中之一。她将测量结果(一个宇称比特、一个相比特)通过经典通道传递给 Bob。收到信息后, Bob 对自己分享的 q 比特  $|\cdot\rangle_B$  进行么正变换,变换与收到的 EPR-Bell 态的关系根据以下协议(表 2.2)规定。

表 2.2 量子远程传态协议

么正变换	EPR 态	么正变换	EPR 态
$1_B$	$ \phi^+\rangle_{CA}$	$\sigma_2^{(B)}$	$ \psi^-\rangle_{CA}$
$\sigma_1^{(B)}$	$ \psi^+\rangle_{CA}$	$\sigma_3^{(B)}$	$ \phi^-\rangle_{CA}$

这样做了之后, Bob 所掌握的正是  $|\chi\rangle_B$  态,证明如下。令 Alice 的未知 q 比特为  $|\chi\rangle_C = a|0\rangle_C + b|1\rangle_C$ , 直接计算得出

$$\begin{aligned}
 |\chi\rangle_C |\phi^+\rangle_{AB} &= (a|0\rangle_C + b|1\rangle_C) \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle_{AB} + |11\rangle_{AB}) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a|000\rangle_{CAB} + a|011\rangle_{CAB})(b|100\rangle_{CAB} + b|111\rangle_{CAB}) \\
 &= \frac{1}{2}a(|\phi^+\rangle_{CA} + |\phi^-\rangle_{CA})|0\rangle_B + \frac{1}{2}a(|\psi^+\rangle_{CA} + |\psi^-\rangle_{CA})|1\rangle_B + \\
 &\quad \frac{1}{2}b(|\phi^+\rangle_{CA} - |\phi^-\rangle_{CA})|0\rangle_B + \frac{1}{2}b(|\phi^+\rangle_{CA} - |\phi^-\rangle_{CA})|1\rangle_B \\
 &= \frac{1}{2}|\phi^+\rangle_{CA}(a|0\rangle_B + b|1\rangle_B) + \frac{1}{2}|\psi^+\rangle_{CA}(a|1\rangle_B + b|0\rangle_B) + \\
 &\quad \frac{1}{2}|\psi^-\rangle_{CA}(a|1\rangle_B - b|0\rangle_B) + \frac{1}{2}|\phi^-\rangle_{CA}(a|0\rangle_B - b|1\rangle_B) \\
 &= \frac{1}{2}|\phi^+\rangle_{CA}|\chi\rangle_B + \frac{1}{2}|\psi^+\rangle_{CA}\sigma_1|\chi\rangle_B + \\
 &\quad \frac{1}{2}|\psi^-\rangle_{CA}(-i\sigma_2)|\chi\rangle_B + \frac{1}{2}|\phi^-\rangle_{CA}\sigma_3|\chi\rangle_B \tag{2.3.12}
 \end{aligned}$$

结果表明,对 Alice 的 q 比特  $|\chi\rangle_C$  和共享的缠绕对中 Alice 的 q 比特  $|\cdot\rangle_A$  进行贝尔测量,结果是 4 种等概率出现的选择,而每一个都按照表 2.2 和 Bob 的 q 比特  $|\chi\rangle_B$  相联系。造成这种结果的正是测量过程,该过程一方面将 CA 对投影到贝尔态之一,同时改变了 Bob 的 q 比特。表 2.2 中规定的对应正是为了将 B 处的 q 比特经过适当的么正变换恢复到状态  $|\chi\rangle$ 。从效果上看,状态  $|\chi\rangle$  是从 A 远程传递到 B。这看起来有些令人困惑,一个经典通道如何能够传递关于 q 比特的信息。实际上起量子通道作用的是二人分享的缠绕对。重要的是,远程传态是和非克隆定理完全相洽的。q 比特  $|\chi\rangle_C$  在复制品  $|\chi\rangle_B$  产生前就被测量过程消灭了。这个妙法被称为“量子远程传态<sup>[29]</sup>”。

利用光子极化的量子远程传态是由 Innsbruck 研究组<sup>[24]</sup>实现的,成功率是 25%,此后由史砚华研究组<sup>[30]</sup>实现,成功率为 100%。连续变量的远程传态是由 L. Vaidman<sup>[31]</sup>建议

的,在实验上由加州理工大学研究组<sup>[32]</sup>实现。塞林格研究组<sup>[33]</sup>实现了跨过维也纳多瑙河 600m 远的光子高保真度远程传递。量子通道(光纤安装在河床下面的隧道中)暴露在温度涨落和其他环境因素干扰下,实验难度是很大的。一个微妙的问题是: Bob 要根据 Alice 的贝尔测量结果准备么正变换,换句话说他应该在分享的 q 比特到达之前准备好仪器。在这个实例中, Alice 的测量结果通过经典的微波通道传递给 Bob,比分享的 q 比特早到  $1.5\mu\text{s}$ , 后者是通过光纤传递,速度是  $\frac{2}{3}c$  ( $c$  为光速)。Bob 可以在这个时间间隔内激活他的电-光调制器。

## 2.4 六光子单态——免退相干态之一例

量子叠加态在与环境的各种相互作用中会经受退相干,但在这些相互作用中通常有一种是最重要的。因此,最好将信息用一种对这种相互作用具有“免疫性”的状态来编码。如果相互作用具有一种对称性,则不论它有多么强,总会存在一些状态对于相互作用是不变的。如果两个光子缠绕起来形成单态,则“集体噪声”(可以改变光子偏振态的噪声,但它的影响对于两个光子是同时并且是等同的)就不会产生退相干。H. Weinfurter 等人<sup>[51]</sup>成功得到了对于集体噪声不变的二光子和四光子纠缠态。M. Bourennane 等人<sup>[52]</sup>成功合成了六光子单态,它对于其组成的六个光子同时施加偏振旋转的作用是不变的。实验采用了紫外光脉冲,在非线性晶体上的参量下变换。M. Bourennane 集中观察了变换后产生的三个彼此不可区分的光子对,见图 2.4。每一对的两个光子在不同方向发射,六个光子形成两组,各有三个光子,在图中用实点表示。这些光子随后用分束器分开并进入偏振分析器,每个分析器由偏振分束器(图中的 PBS)和两个光子探测器组成。

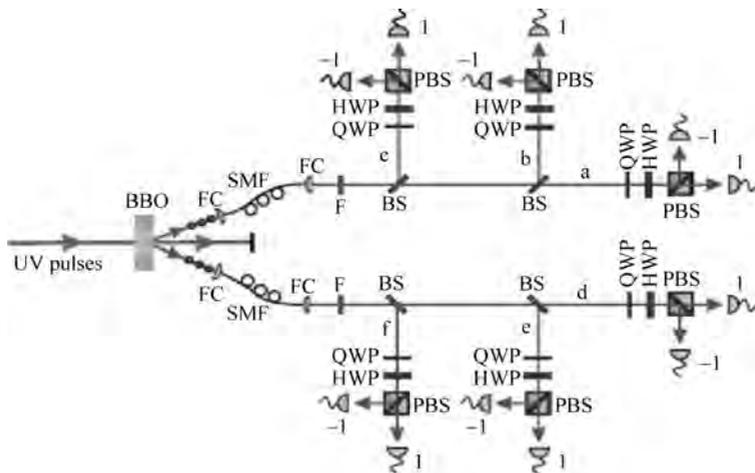


图 2.4 产生和分析六光子偏振缠绕态的实验装置示意图

这个缠绕态是一个六光子的 Greenberger-Horne-Zeilinger (GHZ) 态和两个三光子 W 态乘积的叠加,即

$$|\Psi_6^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|GGZ_6^-\rangle + \frac{1}{2}(|\tilde{W}_3^-\rangle|W_3\rangle - |W_3\rangle|\tilde{W}_3^-\rangle)) \quad (2.4.1)$$

此处

$$\begin{aligned} |GHZ_6^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|HHHVVV\rangle - |VVVHHH\rangle) \\ |W_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|HHV\rangle + |HVH\rangle + |VHH\rangle) \\ |\tilde{W}_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|VVH\rangle + |VHV\rangle + |HVV\rangle) \end{aligned} \quad (2.4.2)$$

研究者采用了三种不同的偏振基的完全测量来演示“旋转不变性”，即采用了(H,V),(L,R)和(D,A),此处

$$\begin{cases} |L(R)\rangle = [|H\rangle \pm i|V\rangle]/\sqrt{2} \\ |D(R)\rangle = [|H\rangle \pm |V\rangle]/\sqrt{2} \end{cases} \quad (2.4.3)$$

所得的三种图样几乎不可区分。实验观测结果和理论预期的重叠度达到了 88%。这是走向量子信息操控的一个重要的进展,因为要编码一个任意的、对集体噪声免疫的二量子比特的逻辑状态至少需要六个光子。在大洋两岸的信息发送者和接收者对于偏振态 H 和 V 的不同定义实际上就相当于一个作用于六个光子的么正变换,因此是无关紧要的。

我们知道,每一个光脉冲在参量下变换的过程中会产生不同数目的光子对。如何选出六光子缠绕单态(而且要非破坏性地!)作为实际应用还是一个远未解决的问题。

## 2.5 本章小结

量子力学对量子信息学和量子计算的应用已经创建了一个新的方向,理论和实验成果大量涌现。作为反馈,这个新领域的问题也已经推进了量子力学基础概念、特别是缠绕态的研究。在上面的讨论中只涉及二组分纯缠绕态。下面简单列举在实现量子计算机的发展过程中得到推动的新进展。

在这个方向的主要问题之一是,各种干扰会导致叠加态的退相干、缠绕态的退化、在传输过程中和在 q 比特操作中发生错误等;而量子计算机在抗干扰方面往往是脆弱的。经典计算机也会发生错误,应对方法是采用纠错编码:将信息做好备份,当作控制。但由于量子非克隆定理,在量子计算中不能采用同样的方法。量子纠错编码<sup>[34]</sup>需要冗余信息,以备数据通过噪声通道时会有损失。编码将输入信息编为 5 个 q 比特的缠绕态<sup>①</sup>,当任何 q 比特遭遇破坏时,解码器就将第一个 q 比特恢复为原样,而将错误的效应分散在其他 4 个 q 比特,接着把它们抛弃。“容忍错误的量子计算”(quantum fault tolerating computation,见文献[35]评述)将量子纠错编码用于逻辑状态 $|\psi_L\rangle$ ,存储或进行运算,处理信息通过一束平行通道,周

<sup>①</sup> 令  $\psi = a|0\rangle + b|1\rangle$ 。克隆  $\psi \rightarrow \psi \otimes \psi \otimes \psi$  是量子力学不允许的,但  $\psi = a|0\rangle + b|1\rangle \rightarrow a|000\rangle + b|111\rangle \neq \psi \otimes \psi \otimes \psi$  是允许的。这是经典计算的“三重重复”的推广。量子纠错需要 5 个 q 比特,因为 Bool 态的叠加需要保护。

期性设置有恢复门阵列。在每个阵列中备有清洁的辅助  $q$  比特,纠正错误后误差的效应分散在一些辅助  $q$  比特中,此后将它们抛弃。在恢复阵列中也会出现错误,它们可以在下一个恢复阵列中得到改正。多粒子缠绕态在纠错中起重要作用。在 1.10.4 节中,三光子缠绕态<sup>[36]</sup>被用来检验“定域实在性理论”,它们是 8 种最大缠绕 Greenberger-Horne-Zeilinger 态的例子<sup>[37]</sup>。同一个实验组获得了四光子缠绕态<sup>[38]</sup>。五光子缠绕态由潘建伟的中国科学技术大学实验组实现<sup>[39]</sup>。五个或更多的缠绕粒子的操控对于普适纠错和开放地址远程传态是需要的。四个俘获离子的缠绕态由美国国家标准和工艺研究院(NIST)的研究组<sup>[40]</sup>实现。在处理和传输过程中的退相干导致混合态缠绕<sup>[41]</sup>。为了恢复最大缠绕,需要一个纯化(蒸馏)过程<sup>[42]</sup>,实验过程由 Innsbruck 研究组<sup>[43-44]</sup>实现。多粒子缠绕和混合态缠绕的理论是十分丰富和具有挑战性的,有很多未解决的问题等待进一步研究。

为了保持相干性,可以采用一个体系,将每一个  $q$  比特和一个辅助  $q$  比特配对,并将它们编码为保持相干状态<sup>[45]</sup>,或者在无退相干子空间工作<sup>[46]</sup>,它已在实验上实现<sup>[47]</sup>。

物理学各分支的实验研究往往被理论上的巨大进展所激励。在 1995 年 C. H. Bennett 和 D. P. DiVincenzo 发表了一篇文章,题为“量子计算——走向工程时代”<sup>[48]</sup>。在当时怀疑派还在打赌,“在一个 500 位的数被因子化以前连太阳都要烧完了”。从那时开始,有利于量子计算机的依据逐渐增加,但要将其实现还有很长的路要走。D. P. DiVincenzo 和 D. Loss<sup>[49]</sup>给出了一张表,列出了在达到最终目标以前需要解决的一些问题。对于近期的实验结果,读者可以参考专著<sup>[50]</sup>。

## 参考文献

- [1] BENIOFF P. The computer as a physical system: A microscopic quantum mechanical Hamiltonian model of computers as represented by Turing machines[J]. *Journal of Statistical Physics*, 1980, 22: 563-591.
- [2] BENIOFF P. Quantum mechanical Hamiltonian models of Turing machines[J]. *Journal of Statistical Physics*, 1982, 29: 515-546.
- [3] BENIOFF P. Quantum mechanical models of Turing machines that dissipate no energy[J]. *Physical Review Letters*, 1982, 48: 1581-1585.
- [4] FEYNMAN R P. Simulating physics with computers[J]. *International Journal of Theoretical Physics*, 1982, 21(6-7): 467-488.
- [5] FEYNMAN R P. Quantum mechanical computers[J]. *Optics News*, 1985, 11(2): 11-20.
- [6] LANDAUER R. Information is physical[J]. *Physics Today*, 1991, 44(5): 23.
- [7] BENNETT C H, DIVINCENZO D P. Quantum information and computation[J]. *Nature*, 2000, 404(6775): 247-255.
- [8] FEYNMAN R P. Feynman lectures on computation[M]. Massachusetts: Addison-Wesley, 1996.
- [9] NIELSEN M A, CHUANG I L. Quantum computation and quantum information[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- [10] PRESKILL J. Lecture notes on quantum information and computation[EB/OL]. [2022-09-05]. <http://www.theory.caltech.edu/people/preskill/ph229/>.
- [11] DEUTSCH D, PENROSE R. Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer[J]. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 1985, 400(1818): 97-117.

- [12] CHUANG I L, VANDERSYPEN L M K, ZHOU X, et al. Experimental realization of a quantum algorithm[J]. *Nature*, 1998, 393: 143-146.
- [13] SHOR P W. Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring [C]// *Proceedings 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science*. Los Alamitos, CA: IEEE Computer Society Press, 1994: 124-134.
- [14] GROVER L K. Quantum mechanics helps in searching for a needle in a haystack[J]. *Physical Review Letters*, 1997, 79: 325-328.
- [15] CHUANG I L, GERSHENFELD N, KUBINEC M. Experimental implementation of fast quantum searching[J]. *Physical Review Letters*, 1998, 80: 3408-3411.
- [16] SEIFE C. The quandary of quantum information[J]. *Science*, 2001, 293: 2026.
- [17] WIESNER S. Simulations of many-body quantum systems by a quantum computer[EB/OL]. 1996. <https://arxiv.org/abs/quant-ph/9603028>.
- [18] MATTLE K, WEINFURTER H, KWIAT P G, et al. Dense coding in experimental quantum communication[J]. *Physical Review Letters*, 1996, 76: 4656-4659.
- [19] SCHLIEMANN J, LOSS D, MACDONALD A H. Double-occupancy errors, adiabaticity, and entanglement of spin qubits in quantum dots[J]. *Physical Review B*, 2001, 63: 085311.
- [20] SCHLIEMANN J, CIRAC J I, KUŚ M, et al. Quantum correlations in two-fermion systems[J]. *Physical Review A*, 2001, 64: 022303.
- [21] LI Y S, ZENG B, LIU X S, et al. Entanglement in a two-identical-particle system[J]. *Physical Review A*, 2001, 64: 054302.
- [22] PAŠKAUSKAS R, YOU L. Quantum correlations in two-boson wave functions[J]. *Physical Review A*, 2001, 64: 042310.
- [23] ABRAMS D S, LLOYD S. Simulation of many-body Fermi systems on a universal quantum computer [J]. *Physical Review Letters*, 1997, 79: 2586-2589.
- [24] BOUWMEESTER D, PAN J W, MATTLE K, et al. Experimental quantum teleportation[J]. *Nature*, 1997, 390(6660): 575-579.
- [25] BENNETT C H, BRASSARD G. Quantum cryptography: Public key distribution and coin tossing [C]// *Proceedings of International Conference on Computers, Systems & Signal Processing*, Dec. 9-12, 1984, Bangalore, India. Bangalore: Steering Committee, 1984.
- [26] EKERT A K. Quantum cryptography based on Bell's theorem[J]. *Physical Review Letters*, 1991, 67: 661-663.
- [27] BENNETT C H, BRASSARD G, MERMIN N D. Quantum cryptography without Bell's theorem [J]. *Physical Review Letters*, 1992, 68: 557-559.
- [28] JENNEWEIN T, SIMON C, WEIHS G, et al. Quantum cryptography with entangled photons[J]. *Physical Review Letters*, 2000, 84: 4729-4732.
- [29] BENNETT C H, BRASSARD G, CRÉPEAU C, et al. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels[J]. *Physical Review Letters*, 1993, 70: 1895-1899.
- [30] KIM Y H, KULIK S P, SHIH Y. Quantum teleportation of a polarization state with a complete bell state measurement[J]. *Physical Review Letters*, 2001, 86: 1370-1373.
- [31] VAIDMAN L. Teleportation of quantum states[J]. *Physical Review A*, 1994, 49: 1473-1476.
- [32] FURUSAWA A, SØRENSEN J L, BRAUNSTEIN S L, et al. Unconditional quantum teleportation [J]. *Science*, 1998, 282: 706-709.
- [33] URSIN R, JENNEWEIN T, ASPELMEYER M, et al. Quantum teleportation across the Danube[J]. *Nature*, 2004, 430(7002): 849-849.
- [34] SHOR P W. Scheme for reducing decoherence in quantum computer memory[J]. *Physical Review A*,

- 1995,52; R2493-R2496.
- [35] PRESKILL J. Reliable quantum computers[J]. Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 1998, 454(1969): 385-410.
- [36] BOUWMEESTER D, PAN J W, DANIELL M, et al. Observation of three-photon Greenberger-Horne-Zeilinger entanglement[J]. Physical Review Letters, 1999, 82: 1345-1349.
- [37] GREENBERGER D M, HORNE M A, ZEILINGER A. Going beyond Bell's theorem[M]//Kafatos M. Bell's theorem, quantum theory and conceptions of the universe. Dordrecht, Amsterdam: Springer Netherlands, 1989: 69-72.
- [38] PAN J W, DANIELL M, GASPARONI S, et al. Experimental demonstration of four-photon entanglement and high-fidelity teleportation[J]. Physical Review Letters, 2001, 86: 4435-4438.
- [39] ZHAO Z, CHEN Y A, ZHANG A N, et al. Experimental demonstration of five-photon entanglement and open-destination teleportation[J]. Nature, 2004, 430(6995): 54-58.
- [40] SACKETT C A, KIELPINSKI D, KING B E, et al. Experimental entanglement of four particles[J]. Nature, 2000, 404(6775): 256-259.
- [41] BENNETT C H, DIVINCENZO D P, SMOLIN J A, et al. Mixed-state entanglement and quantum error correction[J]. Physical Review A, 1996, 54: 3824-3851.
- [42] BENNETT C H, BRASSARD G, POPESCU S, et al. Purification of noisy entanglement and faithful teleportation via noisy channels[J]. Physical Review Letters, 1996, 76: 722-725.
- [43] DEUTSCH D, EKERT A, JOZSA R, et al. Quantum privacy amplification and the security of quantum cryptography over noisy channels[J]. Physical Review Letters, 1996, 77: 2818-2821.
- [44] PAN J W, SIMON C, BRUKNER Č, et al. Entanglement purification for quantum communication[J/OL]. Nature, 2001, 410(6832): 1067-1070. <https://doi.org/10.1038/35074041>.
- [45] DUAN L M, GUO G C. Preserving coherence in quantum computation by pairing quantum bits[J]. Physical Review Letters, 1997, 79: 1953-1956.
- [46] LIDAR D A, CHUANG I L, WHALEY K B. Decoherence-free subspaces for quantum computation [J]. Physical Review Letters, 1998, 81: 2594-2597.
- [47] KWIAT P G, BERGLUND A J, ALTEPETER J B, et al. Experimental verification of decoherence-free subspaces[J]. Science, 2000, 290: 498-501.
- [48] BENNETT C H, DIVINCENZO D P. Towards an engineering era? [J]. Nature, 1995, 377(6548): 389-390.
- [49] DIVINCENZO D, LOSS D. Quantum information is physical[J]. Superlattices and Microstructures, 1998, 23(3): 419-432.
- [50] BOUWMEESTER D, EKERT A, ZEILINGER A. The physics of quantum information[M]. Berlin: Springer, 2000.
- [51] BOURENNANE M, EIBL M, KURTSIEFER C, et al. Experimental detection of multipartite entanglement using witness operators[J]. Physical Review Letters, 2004, 92(8): 087902.
- [52] RÅDMARK M, WIEŚNIAK M, ŻUKOWSKI, M, et al. Experimental filtering of two-, four-, and six-photon singlets from a single parametric down-conversion source[J]. Physical Review A, 2009, 80(4).

## 第 3 章

# 量子力学中的几何相

考虑一个无限长的磁通管,全部磁通都局限在管内,因此外面的场强  $\mathbf{B}$  为 0。电子在管外运动,它们会感到磁通管的存在吗?对这个问题的第一个反应可能是“不会”。如果仔细想一想,进入薛定谔方程的是势  $(A_0, \mathbf{A})$  而不是场强  $(\mathbf{E}, \mathbf{B})$ ,可能就会改变“不会”的想法了。虽然在磁通管外  $\mathbf{B}=0$ ,但矢量势  $\mathbf{A}$  却不为 0。通过对这个问题的研究发现了著名的阿哈罗诺夫-玻姆(Aharonov-Bohm)效应。结果是,局域电子态感觉不到磁通管的存在,因为局域的场强为 0,而在通量管附近的波函数为有限的电子延展态,能感受到它的整体效应。这个结论在当时令不少物理学家感到惊讶,这个研究也得出了著名的结论,即在带电粒子的经典电动力学中,物理由场强决定;但服从量子力学薛定谔方程的粒子在电磁场中的运动是由杨振宁和吴大峻引入的不可积相因子决定的,场强是不足以决定物理的,它是欠定的,电磁势是超定的。关于这个问题将在 3.1 节~3.3 节中介绍。

阿哈罗诺夫-玻姆效应可以用微分几何中的概念如平行输运、联络等诠释,本章将在 3.4 节中介绍这些概念,使读者有准备地去接受另一个令人惊讶的概念——贝利相。量子力学中波函数的相位是一个微妙的概念。考虑与时间有关的薛定谔方程的解。方程中的势按事先确定好的时间的周期函数演化。当势经过一个周期回到初始的形式时,出现了非平庸的问题。波函数是否回到了它初始的形式呢?答案是否定的。出现了与时间有关的相位,能否将波函数重新定义从而将相因子吸收在其中呢?为了回答这个问题需要进行仔细的研究,由此产生的贝利相以及相关问题将在 3.5 节~3.7 节中介绍。贝利相不仅在量子力学中有重要的意义,而且在物理学的许多分支中都有深远的影响。

### 3.1 阿哈罗诺夫-玻姆效应

带电粒子(如电子)在给定的电磁场中的运动问题在量子力学早期发展中就已得到解决。经典的例子是电子在库仑场(Coulomb field)场中的运动——类氢原子问题,以及电子在均匀磁场中的运动——朗道能级(Landau level)问题。电子在电磁场中运动的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m} \left[ -i\hbar\nabla - \frac{e}{c}\mathbf{A}(x) \right]^2 + eA_0(x) \quad (3.1.1)$$

此处  $(A_0, \mathbf{A})$  是电磁场的标量和矢量势。在电动力学中电磁场的场强和势的关系为

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\nabla A_0 - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \quad (3.1.2)$$

在势  $A_\mu(A_0, \mathbf{A})$  的规范变换下

$$A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \Lambda \quad (3.1.3)$$

即

$$A_0 \rightarrow A_0 - \frac{1}{c} \frac{\partial \Lambda}{\partial t},$$

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \Lambda$$

$\mathbf{B}$  和  $\mathbf{E}$  是不变的。表征变换的  $\Lambda$  是时空坐标的任意函数。在经典电动力学中,代表电磁场的是场强。由于规范变换的自由,势与场强的关系不是一一对应的,而是多对一的。实验直接确定的是场强。在经典电动力学中势是有用的概念,但被认为是属于“导出的概念”(derived concept)。在量子力学中,直接进入基本方程的是势,而不是场强。在势的规范变换式(3.1.3)下,波函数必须作相应变化,即

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = \psi(x) e^{(ie/\hbar c)\Lambda(x)} \quad (3.1.4)$$

才能使薛定谔方程

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi$$

保持不变。规范变换式(3.1.3),式(3.1.4)中的  $\Lambda$  是时空坐标的任意函数,这种变换称为“定域(local)规范变换”。

令  $\psi_0(\mathbf{x})$  代表  $H_0 = \frac{1}{2m} (-i \hbar \nabla)^2 + eA_0$  的本征函数,则它和  $H$ (式(3.1.1))的本征函数  $\psi(\mathbf{x})$  之间存在以下关系:

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi_0(\mathbf{x}) \exp \left[ (+ie/\hbar c) \int_{x_0}^{\mathbf{x}} \mathbf{A}(\mathbf{x}') \cdot d\mathbf{x}' \right] \quad (3.1.5)$$

这个关系可以用直接代入方程  $H\psi = E\psi$  而导致  $H_0\psi_0 = E\psi_0$  得到验证。式(3.1.5)中,指数上的积分上限为  $x$ ,下限可以选定任一空间点  $x_0$  作参考,这个下限在积分中就不标出了。从参考点  $x_0$  到  $x$  的线积分在一般情况下是和路径有关的。图 3.1 画出了在磁通  $\Phi$  穿过平面的情况下,从  $x_0$  到  $x$  的两条路径 1 和 2。取沿不同路径的线积分之差,有

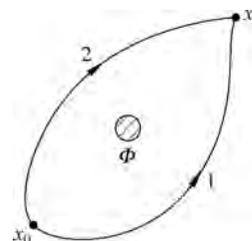


图 3.1 不可积相因子与路径有关

$$\int_1^x \mathbf{A}(x') \cdot dx' - \int_2^x \mathbf{A}(x') \cdot dx' = \left( \int_1^x + \int_2^{x_0} \right) \mathbf{A}(x') \cdot dx'$$

$$= \oint \mathbf{A}(x') \cdot dx'$$

用斯托克斯定理(Stokes' theorem)可得

$$\oint \mathbf{A}(x') \cdot dx' = \int_S \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = \Phi \quad (3.1.6)$$

此处  $S$  是闭合路径所围的面积,面积元  $d\mathbf{S}$  的方向垂直于平面, $\mathbf{B}$  是矢量势  $\mathbf{A}$  所决定的场强, $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ 。磁通的存在使空间成为多联通的。由于积分与路径有关,式(3.1.5)的相因子就不可能写成一个单值函数,这个相因子称为“不可积相因子”。

在量子力学中一个波函数的总体相因子(overall phase factor)是不进入任何可观测量

表达式的,因此可以任意地设置为1。但如果波函数是由两部分叠加的,即

$$\psi = \psi_1 + \psi_2$$

则  $\psi_1$  和  $\psi_2$  的相对相因子是十分重要的,因为它确定了  $\psi_1$  与  $\psi_2$  的干涉。

1959年阿哈罗诺夫(Y. Aharonov)和玻姆(D. Bohm)发表了一篇论文(《量子理论中电磁势的意义<sup>[1-2]</sup>》),文中考虑了电子双缝衍射实验(图3.2(a))。在缝后有一个很细的磁通量管,管内磁通为  $\Phi$ 。这可以近似地用一个细长的螺线管来实现。磁场  $\mathbf{B}$  被完全限制在管内,在管外各处  $\mathbf{B}=0$ 。管中磁通量的变化能影响屏幕上的干涉条纹吗?如果考虑到电子在衍射过程中没有感受到磁场  $\mathbf{B}$ ,干涉条纹似乎不应受  $\Phi$  变化的影响。而如果严格按量子力学分析,双缝平面后的电子波函数在  $\Phi=0$  的情况下为

$$\psi^{(0)}(x) = \psi_1^{(0)}(x) + \psi_2^{(0)}(x) \quad (3.1.7)$$

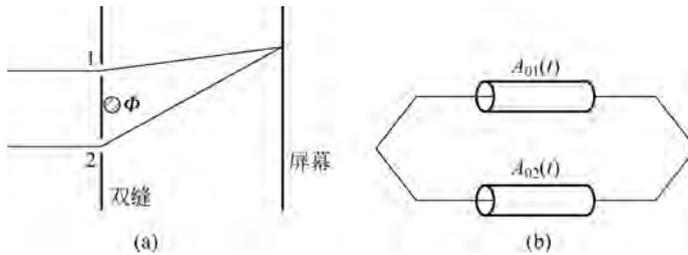


图3.2 阿哈罗诺夫-玻姆效应

(a) 电子波通过有矢势的空间; (b) 电子波通过不同电压的导体圆筒

而在有通量  $\Phi$  的情况下:

$$\psi(x) = \exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \int_{(1)}^x \mathbf{A}(x') \cdot dx'\right] \psi_1^{(0)}(x) + \exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \int_{(2)}^x \mathbf{A}(x') \cdot dx'\right] \psi_2^{(0)}(x) \quad (3.1.8)$$

式中(1),(2)表示线积分路径通过狭缝1和2。弃去式(3.1.8)中的一个总相因子,有

$$\psi(x) = \psi_1^{(0)}(x) + \exp\left[\frac{ie}{\hbar c} \oint \mathbf{A}(x') \cdot dx'\right] \psi_2^{(0)}(x) = \psi_1^{(0)}(x) + e^{(ie/\hbar c)\Phi} \psi_2^{(0)}(x)$$

和式(3.1.7)相比,相干两束波的相对相位差改变了  $\frac{e}{\hbar c}\Phi$ ,它称为“阿哈罗诺夫-玻姆相  $S_{AB}$ ”:

$$S_{AB} = \frac{e}{\hbar c} \Phi \quad (3.1.9)$$

在  $\Phi$  变化时,干涉条纹会有所移动,且当  $\Delta\Phi = \frac{\hbar c}{e} 2\pi = \frac{hc}{e}$  时,条纹变化一个周期,还原为  $\Delta\Phi=0$  时的情况。

考虑电子分开的波束分别进入理想导体板制成的圆柱体,导体上施加电压  $A_{01}(t)$ ,  $A_{02}(t)$ (图3.2(b))。电子在运动中并没有感受到电场。但相应哈密顿量

$$\left. \begin{aligned} H &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + eA_0(x, t) \\ H_0 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \end{aligned} \right\} \quad (3.1.10)$$

的薛定谔方程的解  $\psi$  与  $\psi_0$  有以下关系:

$$\psi(x, t) = \psi_0(x, t) \exp \left[ (-ie/\hbar c) \int^t A_0(x, t') dt' \right] \quad (3.1.11)$$

对于图 3.2(b)的情况,相干的波函数为

$$\psi(x, t) = \psi_1^{(0)}(x, t) + \exp \left\{ (-ie/\hbar c) \int^t [A_{02}(x, t') - A_{01}(x, t')] dt' \right\} \psi_2^{(0)}(x, t) \quad (3.1.12)$$

因此也应随  $A_{01}$  和  $A_{02}$  的变化观察到干涉条纹的移动。这种在无场强的情况下由电磁势 ( $A_0, \mathbf{A}$ ) 的变化导致量子干涉条纹移动的效应,称为“阿哈罗诺夫-玻姆效应”(Aharonov-Bohm effect)。

式(3.1.9)中的相对相因子是规范不变的。因为  $\Phi$  取决于  $\mathbf{B}$ , 而  $\mathbf{B}$  是规范不变的。式(3.1.12)中的相对相因子也是规范不变的,因为  $A_{01}$  和  $A_{02}$  改变了相同的  $\frac{1}{c} \frac{\partial A}{\partial t}$ , 它们的差没有变化。这两种情况可以概括为一个统一的不可积相因子:

$$\exp \left[ (ie/\hbar c) \int^x A_\mu dx^\mu \right] = \exp \left[ (ie/\hbar c) \left( \int^x \mathbf{A}(x') \cdot dx' - \int^t A_0(t') \cdot dt' \right) \right] \quad (3.1.13)$$

阿哈罗诺夫-玻姆效应的意义是深远的。它明确地显示:在量子理论中,对电磁现象而言,场强是欠定的(underdetermine),因为  $\Phi$  变化时干涉条纹移动而场强却保持不变。以规范变换相联系的不同势函数却给出了同样的相对相因子。相位  $\frac{e}{\hbar c} \int^x A_\mu dx^\mu$  相差  $2\pi$  的整数倍也给出了同样的相因子。因此势对电磁现象是超定的(overdetermine)。电磁现象由不可积的相因子  $\exp \left[ (ie/\hbar c) \int^x A_\mu dx^\mu \right]$  完全决定,它包含了对电磁现象必要而充分的描述。这是杨振宁和吴大峻<sup>[3]</sup>在 1975 年表述的。

阿哈罗诺夫-玻姆效应强调了规范势的整体效应,即使场强定域地为 0。阿哈罗诺夫-玻姆相属于几何相,因为积分  $\int^x A_\mu dx^\mu$  不取决于任何运动速度,有别于动力学或运动学效应。它还是拓扑相,因为连续变化积分的封闭路径并不改变相位的值,只要这个变化不改变路径包围的磁通。应该着重说明的是,上面讨论的拓扑性质的产生是由于磁通在二维平面上造成的奇点,使平面成为多连通域。从平面上一点出发经封闭路径回到这一点,路径按照是否包括奇点在内分类。它们在拓扑上是不等价的。拓扑的性质是二维的,即在垂直于  $\Phi$  的平面上。三维空间的一个奇点并不具有这种性质。

阿哈罗诺夫-玻姆效应完全是从量子力学的基本原理出发的,并未引入新的原理或假设,但同时又是出乎很多物理学家意料的。费曼在他的《物理讲座》中写道<sup>[4]</sup>:“像这样的东西就在我们周围 30 年之久<sup>①</sup>,却一直被忽视,是一件有趣的事。之所以被忽视,是由于存在一些定见,究竟什么是重要的,什么是不重要的。”在薛定谔方程中出现的是电磁势 ( $A_0, \mathbf{A}$ ),它在经典力学领域的拉格朗日和哈密顿的描述中同样出现,但在写出运动方程时就被  $\mathbf{E}$  和  $\mathbf{B}$  取代了。在量子力学发展过程中,企图以  $\mathbf{E}$  和  $\mathbf{B}$  完全取代 ( $A_0, \mathbf{A}$ ) 的尝试一直没有成功,原来这里蕴藏了深刻的原因。

<sup>①</sup> 指从量子力学建立到 1959 年这段时间。

阿哈罗诺夫-玻姆效应和磁通量子化有类似之处。1961 年 Deaver 和 Fairbank, 以及 Doll 和 Näbauer 发现中空超导体圆柱内通过的磁通是量子化的, 磁通量子值为  $hc/2e$ 。拜尔斯(N. Byers) 和 杨振宁<sup>[5]</sup> 指出, 这是在超导体内形成库珀对(Cooper pair)的结果。设库珀对波函数<sup>①</sup>  $\psi$  为

$$\psi = \sqrt{\rho} e^{iS} \quad (3.1.14)$$

并设在图 3.3 所示的大块超导体内  $\rho$  为常数,  $S$  为实函数。 $\psi$  是正则动量算符  $\hat{p} = -i\hbar\nabla$

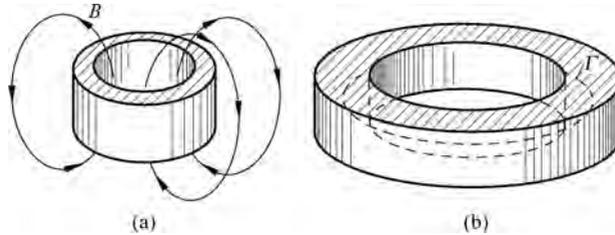


图 3.3 穿过超导环的磁通量子化  
(a) 磁通穿过中空超导圆柱; (b) 封闭积分路径  $\Gamma$

的本征态:

$$\hat{p}\psi = \hbar\nabla\sqrt{\rho} \nabla S e^{iS} = \hbar\nabla S \psi \quad (3.1.15)$$

本征值  $\hbar\nabla S$  就是库珀对的正则动量值。因此其动力学动量  $2m\mathbf{v}$  ( $m$  是电子质量,  $\mathbf{v}$  为速度, 库珀对质量为  $2m$ ) 为

$$2m\mathbf{v} = \hbar\nabla S + 2\frac{e}{c}\mathbf{A} \quad (3.1.16)$$

此处  $e$  是电子电荷的绝对值。在超导环体内选择一封闭路径  $\Gamma$  对式(3.1.16)积分, 有

$$2m\oint_{\Gamma} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{s} = \hbar\oint_{\Gamma} \nabla S \cdot d\mathbf{s} + 2\frac{e}{c}\oint_{\Gamma} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} \quad (3.1.17)$$

超导圆柱厚度比穿透深度大得多, 在  $\Gamma$  上  $\mathbf{v} = 0$ , 因为超导电流只存在于表面。库珀对波函数是单值的, 故有

$$\oint_{\Gamma} \nabla S \cdot d\mathbf{s} = 2\pi n \quad (3.1.18)$$

即相角从一点出发沿  $\Gamma$  走一圈回到原处, 其值只能改变  $2\pi n$  ( $n$  为整数或 0)。式(3.1.17) 此时变为

$$\oint_{\Gamma} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{s} = \Phi = \frac{\hbar c}{2e} 2n\pi = \frac{hc}{2e} n \quad (3.1.19)$$

$\Phi$  是穿过柱心的磁通, 它是磁通量子  $hc/2e$  的整数倍。由于迈斯纳效应(Meissner effect), 超导体内没有磁场。库珀对在超导体内没有感受到磁场, 但其波函数的单值性却对电磁场的整体性质(穿过圆柱心的通量值)产生了影响。

## 3.2 阿哈罗诺夫-玻姆效应的实验验证

阿哈罗诺夫-玻姆效应使许多物理学家感到震惊, 也有不少人感到难以接受。最早的验证来自 1960 年 R. G. Chambers 的实验<sup>[6]</sup> (图 3.4)。点源发出的电子束入射到电子双棱镜上。它

① 请参阅本书 6.1 节和 9.3 节。

的结构是两个接地平板间有一处于正电位的细丝。入射的电子波从丝的两侧经过,被吸引而会聚发生干涉,在下面的平面上形成干涉图像。一个直径约  $1\mu\text{m}$  的磁化铁尖细丝,在一端是锥状尖端,其内部和外部的磁力线示于图 3.4(b)。在没有尖细丝时,两束电子波会聚于垂直于双棱镜细丝的平面内。由于尖细丝外的磁场,两侧的电子受到相反方向的磁场偏转力。它们会聚的平面和双棱镜细丝不再垂直而成一定角度,因而干涉条纹就倾斜了(图 3.4(c)上面一对箭头)。在锥状尖端前方(没有磁通)和后侧(磁通限于尖细丝内)没有磁场,干涉条纹仍然平行于细丝。中间的倾斜正好在两端和平行的条纹相连,表示了由尖细丝内磁通产生的条纹移动。

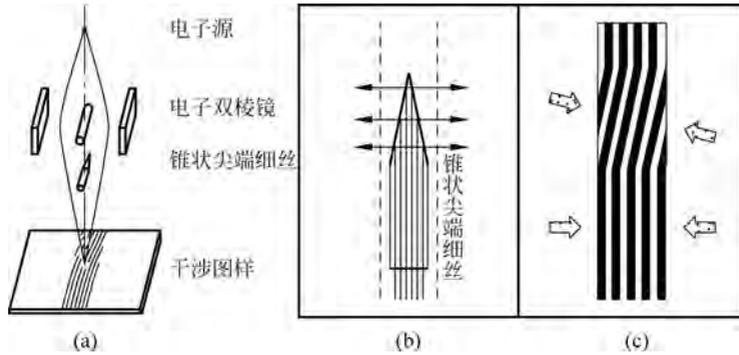


图 3.4 Chambers 的实验

(a) 电子光学系统; (b) 细丝内及附近的磁力线; (c) 干涉条纹

Möllenstedt 和 Bayh 在 1962 年的实验<sup>[7-9]</sup>也用了电子双棱镜,在两束电子波的中点放置细长的螺线管(图 3.5(a))。他们用了—个巧妙的办法,使螺线管内的电流连续增加(磁通随之连续增加),同时使记录干涉条纹的底片连续移动,并用一个细缝使干涉图样只有一小部分落在底片上。这样便把磁通从 0 增到最大值的过程中导致的条纹移动连续记录下来(图 3.5(b))。条纹倾斜源于磁通变化产生了感应电场。在磁通停止增加后,条纹相对于原来的位置有了移动,说明了阿哈罗诺夫-玻姆效应的存在。

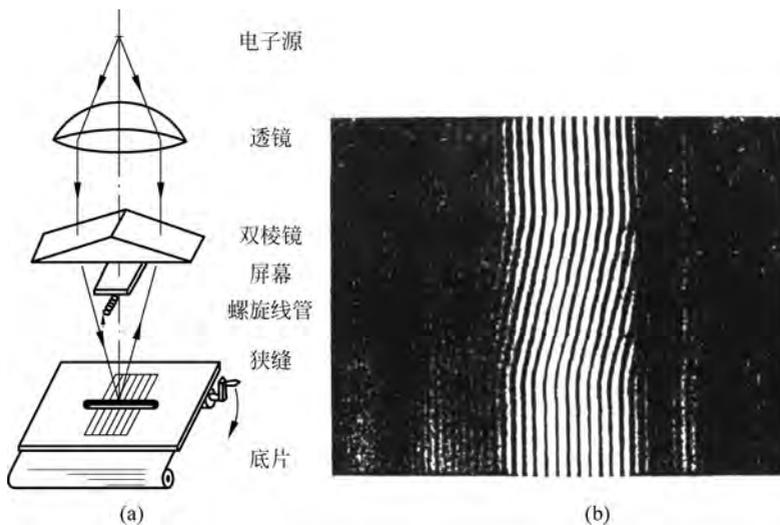


图 3.5 Möllenstedt 和 Bayh 的实验

(a) 电子光学系统示意图; (b) 干涉图像

自阿哈罗诺夫-玻姆效应提出以来,在30年中争论始终不断。一方面有许多工作集中在对实验的重新解释上。由于磁体的磁力线一般总要外泄,螺旋管的磁通在两端也要在空间中散开,电子也会进入螺线管等,这就有可能把观察到的效应和这些问题联系起来。另外一些理论则设法从根本上推翻阿哈罗诺夫-玻姆效应,甚至宣称它是“数学的编造”<sup>①</sup>。一直到1986年情况才产生了根本的变化。“判定性”的实验是殿村和他的合作者用超导体包围的环形磁体所作的电子全息干涉图<sup>[10-12]</sup>。这项研究充分反映了实验技术和工艺对基础物理研究的重要作用。用光刻微制造工艺及真空蒸发工艺制备了完全由超导体Nb包围的小环形坡莫合金磁体,厚度是200Å,Nb层厚2500Å(图3.6)。制备完成之后将磁体从Nb桥上切下(桥是为了保证在制造过程中良好的导热)。另在磁体外蒸镀一层500~2000Å的铜。在实验时处于超导的Nb因迈斯纳效应将磁通全都限制在坡莫合金磁体内,而铜金属层能阻挡电子进入。这两个问题正是许多对阿哈罗诺夫-玻姆效应持怀疑态度的物理学家的意见集中之处。电子全息图<sup>②</sup>是用图3.7(a)所示的设备拍摄的。150kV的场发射电子显微镜(电子的德布罗意波长为0.030Å)提供了高度相干的电子波源。这是用良好的准直度(准直角度为 $10^{-8}$ rad)保证的。和热电子源相比,该装置使电子双棱镜产生的干涉条纹数从300增至3000。电子波的一半通过样品,环内和环外的波产生了相差,这部分称为“物波”。另一半称为“参考波”。物波和参考波通过电子双棱镜后交叠而产生干涉图样。由于通过环内和环外的物波有相差,它们和参考波产生的干涉条纹就有了相对移动。产生了全息图之后还要进行重构。重构是用He-Ne激光进行的,见图3.7(b)<sup>③</sup>。殿村研究组检验了磁通漏泄,用干涉电子显微术进行测量,只选用通量小于 $hc/20e$ 的封闭环形磁体,注意这是在常温下的数值。当Nb进入超导态后,磁通泄漏的值应当比这个值小得多,Nb的厚度是2500Å,而磁场的穿透深度只有1100Å。关于电子可能进入有磁场区域的估计,由于Cu层和Nb层的厚度分别约是1000Å和2500Å,只有 $10^{-6}$ 的电子波能进入。Cu层能有效阻止电子进入,这也可以通过在Cu层厚度从500Å变到2000Å时,超导Nb包围磁体的干涉图像没有变化得到证实。

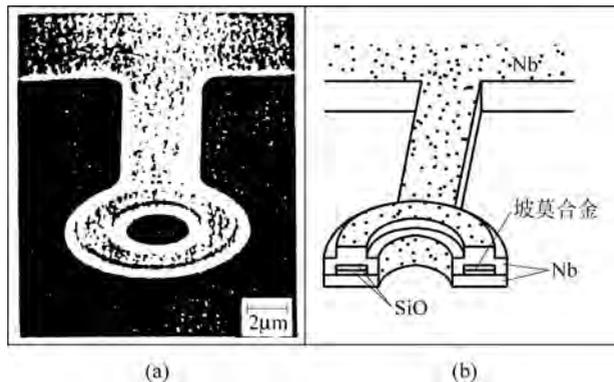


图3.6 殿村实验所用的环形磁体

(a) 环形磁体的扫描电子显微图; (b) 结构示意图

① 请参阅文献[1]51页和殿村的文章。

② 和光学全息学类似,电子全息学用电子形成全息图。在重构干涉图像时用光学方法。电子全息方法是由殿村发展的<sup>[14]</sup>,关于原理的介绍可参阅文献[1]。

③ 关于重构不在此叙述了,请参阅文献[1],文献[11],文献[12]。

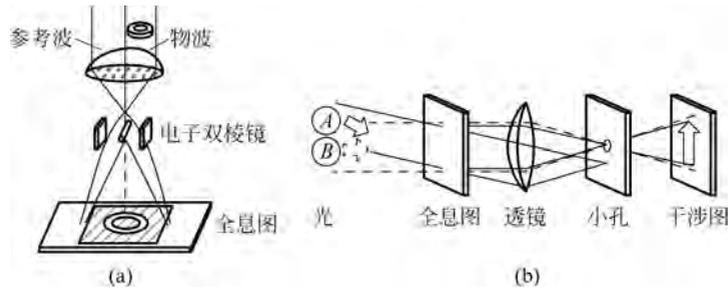


图 3.7 电子全息干涉图

(a) 电子光学系统；(b) 全息图激光重构

用超导 Nb 包围的磁体所产生的电子全息干涉图示于图 3.8。虽然原来磁体的磁通量在连续范围内变化,但在环外和环内通过的电子波与参考波的干涉条纹相差  $\pi$ (上图)或  $0$ (下图)。这可以从环孔内外干涉条纹的移动看到。图中虚线是为了帮助看清条纹移动画上的。磁通  $\Phi$  产生的相差是  $\frac{e}{\hbar c}\Phi = \pi \frac{\Phi}{\hbar c/2e}$ , 当  $\Phi = n \frac{\hbar c}{2e}$  时,相差是  $n\pi$ 。因此,超导体包围的磁通量子化只能给出相差  $\pi$ ( $n$  为奇)或  $0$ ( $n$  为偶)。如果在实验中将样品温度升到 Nb 超导临界温度  $T_c$ (9.2K)之上,干涉条纹移动立刻发生变化,例如图 3.9 相当于  $\Phi = (0.32 + 2n)\pi$ 。从  $T < T_c$  到  $T > T_c$ ,干涉图的变化完全是可逆的。这个系列的实验不仅验证了阿哈罗诺夫-玻姆效应,也印证了超导体包围的磁通是量子化的。此外,用殿村的方法还能直接观测单个磁通量子<sup>[1]</sup>。以上讨论的几个实验在专著[1]中有更详细的介绍。

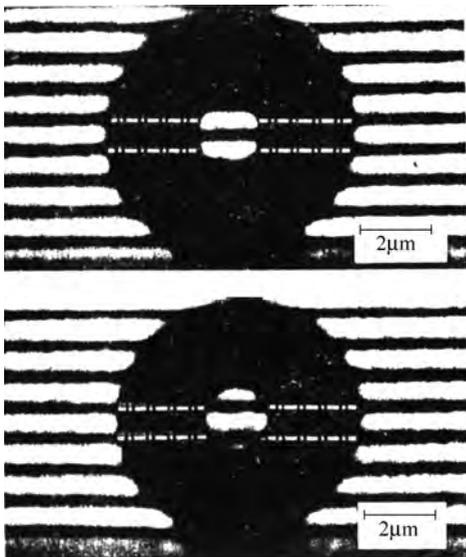
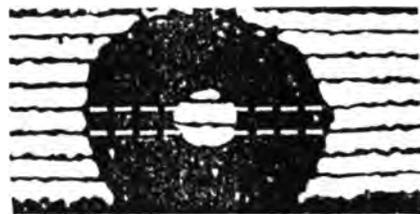


图 3.8 超导 Nb 包围的环状磁体的电子全息干涉图

图 3.9  $T=15\text{K}$  时一个样品的电子全息干涉图  
相位放大 2 倍

### 3.3 阿哈罗诺夫-卡舍尔效应

产生阿哈罗诺夫-玻姆效应的长螺线管可以看作由许多磁偶极矩沿轴线垒积而成。电子沿螺线管两侧不同路径会获得不同相位(图 3.10(a))。根据电磁理论的对偶性,将磁偶极矩换成沿轴的电荷,而一中性粒子(例如中子)带有磁矩(与轴平行),在线电荷两侧不同路径通过(图 3.10(b))也会获得不同相位。这是阿哈罗诺夫(Y. Aharonov)和卡舍尔(A. Casher)在 1984 年提出的<sup>[13]</sup>。这里有一个细致的问题:磁矩在运动中会感受到线电荷的磁场,但它的方向由  $\mathbf{v} \times \mathbf{E}$  决定。 $\mathbf{E}$  在与直线垂直的平面内,磁矩的速度也在这个平面内。因此  $\mathbf{v} \times \mathbf{E}$  和直线平行,亦即与磁矩平行,所以磁矩不受力。考虑一个螺线管(质量为  $M$ , 位于  $\mathbf{R}$ , 速度为  $\mathbf{V}$ )和一个带电粒子(质量为  $m$ , 位于  $\mathbf{r}$ , 速度为  $\mathbf{v}$ )相互作用。体系的拉格朗日量(Lagrangian)是

$$L = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 + \frac{1}{2}M\mathbf{V}^2 + \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{V}) \quad (3.3.1)$$

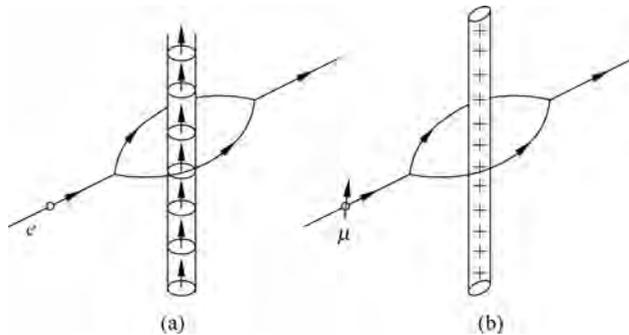


图 3.10 阿哈罗诺夫-玻姆效应和它的对偶阿哈罗诺夫-卡舍尔效应

它导致粒子的运动方程为

$$m\dot{v}_j + \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial r_i} A_j (v_i - V_i) - \frac{e}{c} \frac{\partial}{\partial r_j} A_i (v_i - V_i) = 0$$

即

$$m\dot{\mathbf{v}} = \frac{e}{c} (\mathbf{v} - \mathbf{V}) \times (\nabla_r \times \mathbf{A}(\mathbf{r} - \mathbf{R})) \quad (3.3.2)$$

类似地,还可以得到螺线管的运动方程,  $-M\dot{\mathbf{V}}$  正好等于式(3.3.2)的右侧,即

$$M\dot{\mathbf{V}} + m\dot{\mathbf{v}} = 0 \quad (3.3.3)$$

因此有

$$M\mathbf{V} + m\mathbf{v} = \text{const} \quad (3.3.4)$$

拉格朗日量和运动方程都是伽利略不变和平移不变的。从式(3.3.1)有

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\mathbf{v} + \frac{e}{c}\mathbf{A}, \\ \mathbf{P} &= \frac{\partial L}{\partial \mathbf{V}} = M\mathbf{V} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \end{aligned} \quad (3.3.5)$$

由此,并用式(3.3.4)得

$$\mathbf{p} + \mathbf{P} = m \mathbf{v} + M \mathbf{V} = \text{const} \quad (3.3.6)$$

即动量守恒。在拉格朗日量式(3.3.1)中并没有明显显示出  $m$  和  $M$  哪一个是电荷,哪一个是磁矩,  $\mathbf{A}$  只与相对位置矢量  $\mathbf{r} - \mathbf{R}$  有关。系统有互换对偶性,拉格朗日量描述的也可以是在  $\mathbf{R}$  处质量为  $M$  的电荷和在  $\mathbf{r}$  处质量为  $m$  的磁矩,在两种情况下螺线管的方向是相同的。因此一个磁矩在直线均匀带电体的场中运动时没有感到受力,但在两侧通过的波会有一个相差,即阿哈罗诺夫-卡舍尔相:

$$S_{AC} = -\oint \frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} = \frac{e}{\hbar c} \Phi \quad (3.3.7)$$

由于通量  $\Phi$  就是偶极矩  $\mu$  除以螺线管长度  $\xi$ ,有

$$S_{AC} = \frac{1}{\hbar c} \frac{e}{\xi} \mu = \frac{1}{\hbar c} \lambda \mu$$

此处  $\lambda$  是电荷的线密度。中子的磁矩是  $g \frac{e \hbar}{2Mc}$ ,故有

$$S_{AC} = \frac{\lambda}{e} g 2\pi\alpha \frac{\hbar}{Mc} \quad (3.3.8)$$

$\alpha = e^2/4\pi \hbar c$  是精细结构常数,作一估计:  $g = O(1)$ ,康普顿波长(Compton wavelength)  $\frac{\hbar}{Mc} = 2 \times 10^{-14} \text{cm}$ 。如果要产生易观测到的相差  $S_{AC} = \pi/2$ ,则所需的电荷线密度甚大:

$$\lambda \approx e/10^{-15} (\text{cm}^{-1}) \quad (3.3.9)$$

因此在实验室条件下所能观察到的相移是很小的。墨尔本大学和密苏里大学的合作研究组在1989年报道了观测结果<sup>[14]</sup>。他们使反应堆中子进入硅晶体中子干涉仪,干涉仪的两臂之间有一中央电极置于45kV,该装置示于图3.11。对于这个装置,理论预计的相差是1.5mrad。为了积累足够的中子计数,数据获取用了几个月的时间。最后的结果是  $2.19 \text{mrad} \pm 0.52 \text{mrad}$ 。

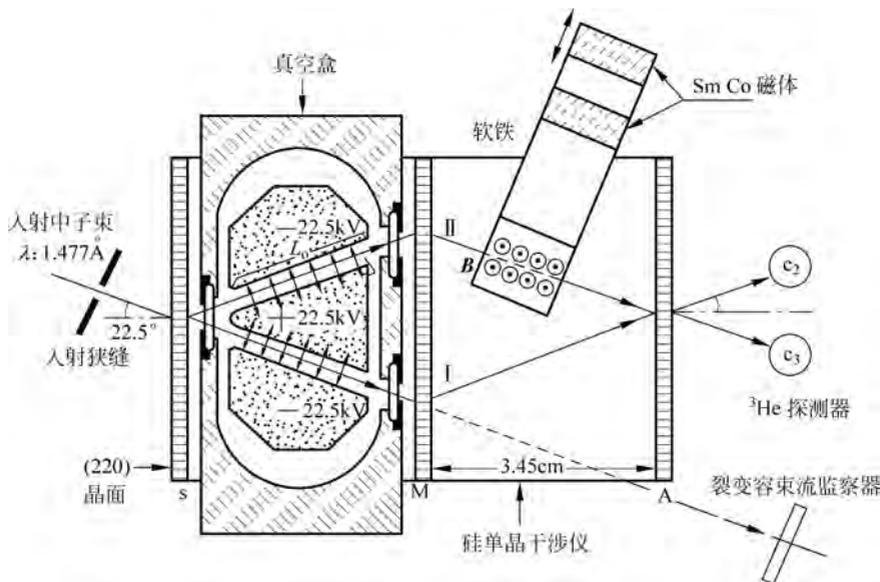


图 3.11 中子束干涉仪中的剖面图

### 3.4 平行输运, 联络, 曲率和非完整性

在物理学中首先应用微分几何概念的是爱因斯坦的广义相对论。规范场理论以其内部对称性提供了更丰富的与微分几何-纤维丛的联系。

外尔(H. Weyl)在广义相对论建立的引力与几何关系的鼓舞下,在1919—1921年尝试赋予电磁场以几何意义。他设想时空各点都有不同的尺度。从一点  $x^\mu$  到  $x^\mu + dx^\mu$ , 尺度变化为  $1 + S_\mu dx^\mu$ 。今有时空坐标函数  $f(x)$ , 在从  $x^\mu$  到  $x^\mu + dx^\mu$  时的变化是

$$f(x) \rightarrow (f + \partial_\mu f dx^\mu)(1 + S_\mu dx^\mu) \approx f + (\partial_\mu + S_\mu) f dx^\mu \quad (3.4.1)$$

外尔尝试把尺度函数  $S_\mu$  和电磁势  $A_\mu$  联系起来,然而他的努力未获成功。量子力学诞生之后,人们了解到在哈密顿量中有  $(-i\partial_\mu - \frac{e}{c}A_\mu)$  作为动力学动量算符。和式(3.4.1)相比,原来  $S_\mu$  和  $iA_\mu$  相当。电磁势并未提供一个实的尺度,而是由于虚数  $i$  使它与式(3.1.13)的不可积相因子有关。外尔在此基础上发展了电磁场的规范不变性理论,然而他并没有改变原来用于“尺度”不变性(gauge invariance)的名词,这个词就沿用至今了。

在弯曲空间中首先要介绍“平行输运<sup>①</sup>”的概念。在任何空间中要比较不同点处的矢量场  $\mathbf{V}_\mu(x)$  和  $\mathbf{V}_\mu(x')$ , 先要把  $\mathbf{V}_\mu$  从  $x$  “平行输运”移到  $x'$ 。在平直空间中,这不需要特殊定义(图3.12(a))。假如空间是弯曲的,坐标轴在各点都不相同,平行输运的定义就是在将矢量移动时要使它保持与路径的切线间的角度不变。平行移到  $x'$  之后,矢量场变为  $\mathbf{V}_\mu + \delta\mathbf{V}_\mu$ 。如果  $x' = x + dx$ ,  $\delta\mathbf{V}_\mu$  就线性依赖于  $\mathbf{V}^\nu$  和  $dx^\lambda$ :

$$\delta\mathbf{V}_\mu = \Gamma_{\mu\lambda}^\nu \mathbf{V}_\nu dx^\lambda \quad (3.4.2a)$$

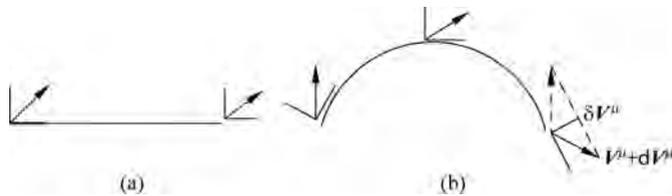


图 3.12 平行输运

(a) 平直空间; (b) 弯曲空间

式(3.4.2a)是  $\Gamma_{\mu\lambda}^\nu$  的定义,它被称为“仿射联络”,是时空坐标函数。对平直空间,  $\Gamma_{\mu\lambda}^\nu = 0$ 。由  $\delta(\mathbf{V}_\mu \mathbf{V}^\mu) = 0$ , 有

$$\delta\mathbf{V}^\mu = -\Gamma_{\nu\lambda}^\mu \mathbf{V}^\nu dx^\lambda \quad (3.4.2b)$$

在  $x$  和  $x + dx$  两点间矢量场的协变微分记为  $D\mathbf{V}_\mu$ , 定义为

$$\begin{aligned} D\mathbf{V}_\mu &= \mathbf{V}_\mu(x + dx) - [\mathbf{V}_\mu(x) + \delta\mathbf{V}_\mu] \\ &= (\partial_\lambda \mathbf{V}_\mu - \Gamma_{\mu\lambda}^\nu \mathbf{V}_\nu) dx^\lambda \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

括号中的量称为“协变导数”或“协变微商”。等价地有

$$\begin{aligned} D\mathbf{V}^\mu &= \mathbf{V}^\mu(x') - [\mathbf{V}^\mu(x) + \delta\mathbf{V}^\mu] \\ &= (\partial_\lambda \mathbf{V}^\mu + \Gamma_{\nu\lambda}^\mu \mathbf{V}^\nu) dx^\lambda \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

① 平行输运(parallel transport)在文献中也称“平行位移”(parallel displacement)。

通过将一矢量沿一封闭曲线平行移动可以定义曲率。图 3.13(a) 是平直空间, 平行输运矢量  $1 \rightarrow 2 \rightarrow 3 \rightarrow 4$  没有变化。而在球面上(图 3.13(b))相应的平行输运回到起点, 矢量转了  $\pi/2$ 。讨论一般情况, 在图 3.14 中从  $P$  出发沿  $PP_1P_2$  和沿  $PP_3P_2$  平行输运的矢量  $\mathbf{V}_\mu$  将得到不同结果。图中  $PP_1$  是矢量  $\mathbf{a}^\alpha$ ,  $PP_3$  是矢量  $\mathbf{b}^\beta$ ,  $P_1P_2$  是平行输运的  $\mathbf{b}$ , 即  $\mathbf{b} + \delta\mathbf{b}$ , 此处的  $\delta\mathbf{b}$  是

$$\delta\mathbf{b}^\beta = -\Gamma_{\xi\gamma}^{\beta} \mathbf{b}^\xi dx^\gamma \quad (3.4.5)$$

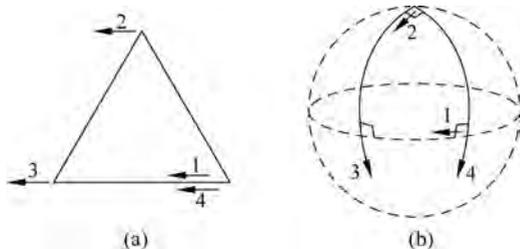


图 3.13 沿封闭曲线平行输运矢量  
(a) 平直空间; (b) 球面

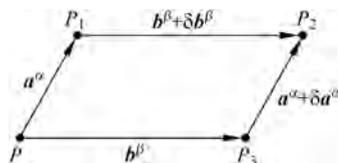


图 3.14 沿不同路径平行输运矢量场

$P_3P_2$  是平行输运的  $\mathbf{a}$ , 即  $\mathbf{a} + \delta\mathbf{a}$ , 此处  $\delta\mathbf{a}$  是

$$\delta\mathbf{a}^\alpha = -\Gamma_{\xi\gamma}^{\alpha} \mathbf{a}^\xi dx^\gamma \quad (3.4.6)$$

经  $PP_1P_2$  输运的矢量场其输运的变化是

$$\delta\mathbf{V}'_\mu = (\Gamma_{\mu\alpha}^\nu \mathbf{V}_\nu)_{P_1} \mathbf{a}^\alpha + (\Gamma_{\mu\beta}^\nu \mathbf{V}_\nu)_{P_1} (\mathbf{b}^\beta + \delta\mathbf{b}^\beta) \quad (3.4.7)$$

经过  $PP_3P_2$  输运的矢量场其输运的变化是

$$\delta\mathbf{V}'_\mu = (\Gamma_{\mu\beta}^\nu \mathbf{V}_\nu)_{P_3} \mathbf{b}^\beta + (\Gamma_{\mu\alpha}^\nu \mathbf{V}_\nu)_{P_3} (\mathbf{a}^\alpha + \delta\mathbf{a}^\alpha) \quad (3.4.8)$$

在  $P_1$  和  $P_3$  处取值的  $(\Gamma_{\mu\beta}^\nu \mathbf{V}_\nu)$  可以通过在  $P$  处取值的量表示:

$$(\Gamma_{\mu\beta}^\nu \mathbf{V}_\nu)_{P_1} = (\Gamma_{\mu\beta}^\nu + \partial_\alpha \Gamma_{\mu\beta}^\nu \mathbf{a}^\alpha) (\mathbf{V}_\nu + \Gamma_{\mu\alpha}^\sigma \mathbf{V}_\sigma \mathbf{a}^\alpha) \quad (3.4.9)$$

$$(\Gamma_{\mu\alpha}^\nu \mathbf{V}_\nu)_{P_3} = (\Gamma_{\mu\alpha}^\nu + \partial_\beta \Gamma_{\mu\alpha}^\nu \mathbf{b}^\beta) (\mathbf{V}_\nu + \Gamma_{\mu\beta}^\sigma \mathbf{V}_\sigma \mathbf{b}^\beta)$$

将式(3.4.5), 式(3.4.6), 式(3.4.9)代入式(3.4.7), 式(3.4.8), 并取其差, 得

$$\Delta\mathbf{V}'_\mu = \delta\mathbf{V}'_\mu - \delta\mathbf{V}'_\mu = \mathbf{R}_{\mu\alpha\beta}^\nu \mathbf{V}_\nu \mathbf{a}^\alpha \mathbf{b}^\beta \quad (3.4.10)$$

此处

$$\mathbf{R}_{\mu\alpha\beta}^\nu = \partial_\alpha \Gamma_{\mu\beta}^\nu - \partial_\beta \Gamma_{\mu\alpha}^\nu + \Gamma_{\mu\beta}^\lambda \Gamma_{\lambda\alpha}^\nu - \Gamma_{\mu\alpha}^\lambda \Gamma_{\lambda\beta}^\nu \quad (3.4.11)$$

式(3.4.10)表明沿不同路径平行输运矢量变化之不同  $\Delta\mathbf{V}'_\mu$  与路径所围面积  $\sigma^{\alpha\beta} = \mathbf{a}^\alpha \mathbf{b}^\beta$  以及被输运的矢量  $\mathbf{V}_\mu$  成正比, 而比例常数就是曲率张量  $\mathbf{R}_{\mu\alpha\beta}^\nu$  (式(3.4.11))。

在阿贝尔规范场 (Abelian gauge field) (例如电磁场) 的条件下, 费米子 (fermion) 波函数的协变微商是

$$D_\mu \psi = \left( \partial_\mu + i \frac{e}{c} \mathbf{A}_\mu \right) \psi \quad (3.4.12)$$

在非阿贝尔规范场的条件下<sup>①</sup>有

① 本书 7.6 节有关于非阿贝尔规范场的介绍, 此处只从数学关系了解即可。

$$D_\mu \psi = (\partial_\mu + ig\mathbf{A}_\mu)\psi \quad (3.4.13)$$

此处  $\psi$  为一具有内部对称性的  $n$  分量波函数。例如对  $SU(2)$  对称,它是二分量子波函数。 $\mathbf{A}_\mu$  是  $n \times n$  矩阵。对于  $SU(2)$  对称,它是  $\mathbf{A}_\mu = \frac{\boldsymbol{\tau}^a}{2} \mathbf{A}_\mu^a, a=1,2,3$ ; 对于重复指标求和,  $\boldsymbol{\tau}^a$  就是泡利矩阵。从  $x$  到  $x+dx$  平行输运  $\psi$  带来的变化是

$$\delta\psi = ig\mathbf{A}_\mu \psi dx^\mu \quad (3.4.14)$$

和式(3.4.4)类比,规范势就相当于仿射联络,而从  $x$  到  $x'$  的变化是

$$P(x',x)\psi = \exp\left[ig\int_x^{x'} \mathbf{A}_\mu(y)dy^\mu\right]\psi \quad (3.4.15)$$

由于  $\mathbf{A}_\mu = \frac{\boldsymbol{\tau}^a}{2} \mathbf{A}_\mu^a$ , 而  $\frac{\boldsymbol{\tau}^a}{2}$  正是  $SU(2)$  群的生成元,每一个路径  $x \rightarrow x'$  就相当于一个  $SU(2)$  群元素。 $P(x',x)$  正是不可积相因子,它就相当于平行输运。在非阿贝尔规范场理论中,规范场强和规范势的关系是

$$\mathbf{F}_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathbf{A}_\nu - \partial_\nu \mathbf{A}_\mu - [\mathbf{A}_\mu, \mathbf{A}_\nu] \quad (3.4.16)$$

此处  $\mathbf{F}_{\mu\nu}$  和  $\mathbf{A}_\mu$  一样,也是  $n \times n$  矩阵。将式(3.4.16)和式(3.4.11)相比,规范场强就相当于曲率,规范场理论几何意义的讨论涉及纤维丛理论。文献[3]中将规范场和纤维丛的概念作了对应。

阿哈罗诺夫-玻姆相实际上也是一个平行输运的例子。电子所在的空间没有场强,但有规范势。没有场强,空间曲率为0,是平直的。在磁通管周围的空间相应于一个圆锥面,各处曲率为0,除去其顶点之外。在顶点处曲率为 $\infty$ ,这是磁通集中之处。阿哈罗诺夫-玻姆相因子就是在锥面上绕一周的平行输运。如图3.15(a)所示,圆锥面可以沿通过顶点A的虚线切开展成平面(图3.15(b))。在平面上的矢量平行输运不会导致它旋转。但在虚线上的一点 $\textcircled{P}$ 在锥面展开后却在楔面上成为两点(仍标为 $\textcircled{P}$ )。矢量沿C输运一周后和初始位置差了 $\alpha$ ,即圆锥的楔角,它的值和磁通量有关。这个角称为“非完整角”(又译为“非和乐角”。holonomy音译“和乐”,完整之意)。封闭曲线C可以任意扭曲,只要不触及奇点A,绕行一周的角度非完整仍是 $\alpha$ 。因此这是一个拓扑效应。

另一个非完整现象是傅科摆(Foucault pendulum)。它摆动的方向以单位矢量 $\hat{e}$ 表示。它总是和所在地的铅直线(实际是地心到当地连线方向的单位矢量 $\hat{r}$ )保持垂直,并必须满足约束条件:即不能沿 $\hat{r}$ 转动。当一昼夜后 $\hat{r}$ 矢量转了一圈(沿当地的纬度小圆C), $\hat{e}$ 却没有回到起始的方向(图3.16中 $e_i$ 和 $e_f$ 分别是起始和终结方向)。这种“局域没有变化(指 $\hat{e}$ 和 $\hat{r}$ 保持垂直,不沿 $\hat{r}$ 转动)却带来整体的变化(指 $\hat{e}$ 转一圈后与起始值差一个角度)”就是 $\hat{e}$ 在球面上平行输运一周所导致的角度非完整性。 $\hat{e}$ 输运一周后的角度之差等于C在地心处所张的立体角:

$$\Omega = 2\pi(1 - \cos\theta) = 2\pi(1 - \sin\phi)$$

此处 $\theta$ 是小圆的极角, $\phi$ 是纬度。这个角度的非完整和沿C转一圈的速率无关,因此是几何相,但与立体角的大小有关,不是拓扑效应。

本节其他内容请参阅文献[15]。

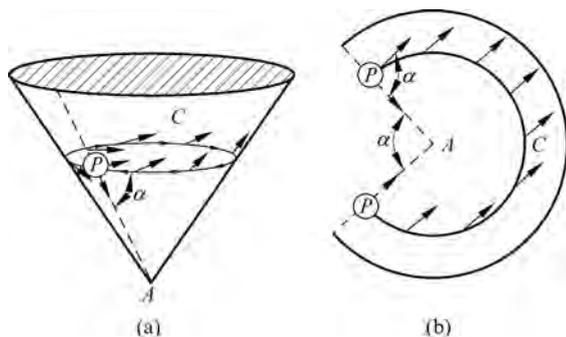
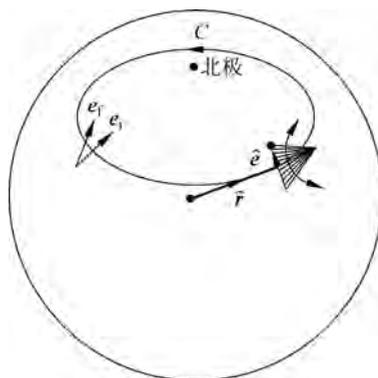


图 3.15 在圆锥面上矢量的平行输运

图 3.16  $\hat{e}$  的平行输运一周带来的角度非完整

### 3.5 贝利相

在一些量子力学问题中可以把力学量分为两个集合。一个集合是随时间快变化的，一个集合是随时间慢变化的。在解这类复杂体系问题时，可先将慢变量固定，求解有关快变量的量子力学问题，然后允许慢变量变化，得到整个体系的解。玻恩-奥本海默近似 (Born-Oppenheimer approximation) 就是用这个方法求解分子问题的。令  $\mathbf{P}$  和  $\mathbf{R}$  为慢变量 (例如原子核的动量和位置)， $\mathbf{p}$  和  $\mathbf{r}$  为快变量 (例如电子的动量和位置)。体系的哈密顿量为

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (3.5.1)$$

先将慢变量冻结。快问题的哈密顿量为

$$h = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (3.5.2)$$

此处  $\mathbf{R}$  是作为参数出现的。设  $h$  的能量本征问题已经解决：

$$h(\mathbf{p}, \mathbf{r}, \mathbf{R}) |m; \mathbf{R}\rangle = \epsilon_m(\mathbf{R}) |m; \mathbf{R}\rangle \quad (3.5.3)$$

此处  $|m; \mathbf{R}\rangle$  是快问题的一个本征态，量子数为  $m$ ， $\mathbf{R}$  作为参数进入本征矢和本征值。 $|m; \mathbf{R}\rangle$  (不同的  $m$ ) 组成分立、非简并态的正交归一完备集。现在将  $\mathbf{R}$  当作随  $t$  慢变化的参数，求快变量问题中波函数随时间的演化。薛定谔方程为

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = h \psi \quad (3.5.4)$$

将  $\psi$  用  $|m; \mathbf{R}\rangle$  展开：

$$\psi = \sum_m a_m(t) \exp\left[-i/\hbar \int_0^t \epsilon_m(t') dt'\right] |m; \mathbf{R}\rangle \quad (3.5.5)$$

指数因子是动力学相因子， $\epsilon_m$  随时间的变化是由参数  $\mathbf{R}$  随时间的慢变化造成的。将式 (3.5.5) 代入式 (3.5.4) 并用式 (3.5.3)，将结果从等号左侧乘以  $\langle k; \mathbf{R} |$ ，就得到展开系数  $a_m(t)$  的时

间微商<sup>①</sup>:

$$\dot{a}_k(t) = - \sum_m a_m \left\langle k; \mathbf{R} \left| \frac{\partial}{\partial t} m; \mathbf{R} \right. \right\rangle \exp \left\{ -i/\hbar \int_0^t [\epsilon_m(t') - \epsilon_k(t')] dt' \right\} \quad (3.5.6)$$

$\frac{\partial}{\partial t} |m; \mathbf{R}\rangle$  可以用式(3.5.3)通过  $\frac{\partial h}{\partial t}$  表示: 将式(3.5.3)对  $t$  微商, 并从左侧乘以  $\langle k; \mathbf{R} |$ , 对  $k \neq m$  情况就得到

$$\left\langle k; \mathbf{R} \left| \frac{\partial}{\partial t} m; \mathbf{R} \right. \right\rangle = \frac{1}{\epsilon_m - \epsilon_k} \left\langle k; \mathbf{R} \left| \frac{\partial h}{\partial t} \right| m; \mathbf{R} \right\rangle, \quad k \neq m \quad (3.5.7)$$

对  $k=m$ , 则从归一化条件  $\langle k; \mathbf{R} | k; \mathbf{R} \rangle = 1$  得

$$\left\langle k; \mathbf{R} \left| \frac{\partial}{\partial t} k; \mathbf{R} \right. \right\rangle + \left\langle \frac{\partial}{\partial t} k; \mathbf{R} \left| k; \mathbf{R} \right. \right\rangle = 0$$

即

$$\left\langle k; \mathbf{R} \left| \frac{\partial}{\partial t} k; \mathbf{R} \right. \right\rangle = i\alpha_k(t) \quad (3.5.8)$$

上式等号右侧为纯虚数。设体系在  $t=0$  时位于某定态  $|n; \mathbf{R}(0)\rangle$ , 即  $a_m(0) = \delta_{mn}$ 。那么, 有限时间体系在不同状态上的概率振幅是什么? 设对  $k \neq n$  的各态, 式(3.5.6)右侧随时间慢变各量为常数, 用式(3.5.7)和  $a_m = \delta_{mn}$ , 得

$$\dot{a}_k = \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_n} \left\langle k; \mathbf{R} \left| \frac{\partial h}{\partial t} \right| n; \mathbf{R} \right\rangle \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (\epsilon_k - \epsilon_n) t \right], \quad k \neq n$$

积分后有

$$a_k(t) \approx \frac{1}{i \hbar (\epsilon_k - \epsilon_n)^2} \left\langle k; \mathbf{R} \left| \frac{\partial h}{\partial t} \right| n; \mathbf{R} \right\rangle \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (\epsilon_k - \epsilon_n) t \right], \quad k \neq n \quad (3.5.9)$$

$k \neq n$  的各态概率振幅都随时间振荡, 并没有表现出长时间稳定增长的趋势。尽管随时间推移,  $\epsilon_n(\mathbf{R})$  和  $|n; \mathbf{R}\rangle$  都已发生了很大变化, 但原位于任何一个定态的体系, 现在仍然位于时间  $t$  的那个状态。在历史上, 爱因斯坦和埃伦费斯特在量子力学诞生以前的 1911 年就设想到了这个结论, 在 1928 年玻恩和福克证明了它。

哈密顿量  $H(t)$  随时间缓慢演化的条件可以包含在以下不等式中<sup>[30]</sup>:

$$\hbar \left| \frac{\left\langle n; \mathbf{R} \left| \frac{\partial}{\partial t} m; \mathbf{R} \right. \right\rangle}{\epsilon_n(t) - \epsilon_m(t)} \right| \ll 1, \quad n \neq m, \quad t \in [0, T]$$

此处  $T$  是演化的时间。K.-P. Marzlin 和 B. C. Sanders<sup>[31]</sup> 指出, 对于绝热本征态变化显著的体系, 不慎重地使用量子绝热定理会导致不自恰。全殿民等人<sup>[32]</sup> 指出, 必须在  $\left\langle n; \mathbf{R} \left| \frac{\partial}{\partial t} m; \mathbf{R} \right. \right\rangle$  和  $\epsilon_n(t) - \epsilon_m(t)$  二者的时间依赖都可以忽略时, 上述条件对于量子绝热定理的成立才是足

① 对定态问题薛定谔方程的解是

$$\psi = \sum_m a_m e^{-i(\hbar)E_m t} |m\rangle$$

此处  $a_m$  与  $t$  无关。但在当前问题中  $|m; \mathbf{R}\rangle$  通过  $\mathbf{R}$  与  $t$  有关, 因此  $\exp \left[ -i/\hbar \int_0^t \epsilon_m(t') dt' \right] |m; \mathbf{R}\rangle$  并不满足薛定谔方程。在展开式(3.5.5)中,  $a_m$  就必须是  $t$  的函数。从式(3.5.6)看  $\dot{a}$  不为 0 是因为  $\frac{\partial}{\partial t} |m; \mathbf{R}\rangle$  的存在。

够的。否则在演化足够长的时间之后,绝热本征态的变化就会变得显著,以至于某些本征态之间的跃迁就会由动力学所驱动。当考虑更为普遍的量子体系时,还要有附加的条件使量子绝热定理成立<sup>[11-12]</sup>。

上面的论据说明了状态  $|n; \mathbf{R}(0)\rangle$  随时间演化,到了时间  $t$  仍然保持在  $|n; \mathbf{R}(t)\rangle$ 。核心的问题是:当哈密顿量随时间缓慢变化时,波函数如何随时间演化。举一个例子来说明思路。在磁场大小不变,但方向随时间变化时,带电粒子的自旋跟随磁场进动。当磁场回到初始方向时,粒子的自旋是否也回到初始方向?为了回答这个问题,我们要仔细分析在磁场方向缓慢变化的情况下,自旋状态如何随时间演化。对精确的本征态  $|n\rangle$ ,随时间演化由动力学相因子  $\exp(-i\epsilon_n t/\hbar)$  决定。随时间缓慢变化的本征值  $\epsilon_n(t)$  可以推广为  $\exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \epsilon_n(t') dt'\right]$ 。因此状态随时间的演化可以写作

$$\psi(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \epsilon_n(t') dt'\right] |n; \mathbf{R}(t)\rangle \quad (3.5.10)$$

此处  $|n; \mathbf{R}(t)\rangle$  为绝热本征态。这就是量子绝热定理。将这个表达式代入薛定谔方程,得到

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(t) = H(t)\psi(t) + \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \epsilon_n(t') dt'\right] i\hbar\frac{\partial}{\partial t} |n; \mathbf{R}(t)\rangle$$

等号右侧第二项在绝热极限下趋于0:

$$\frac{\partial}{\partial t} |n; \mathbf{R}(t)\rangle = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial t} \cdot \partial_{\mathbf{R}} |n; \mathbf{R}(t)\rangle \rightarrow 0$$

当我们考虑绝热循环过程  $\mathbf{R}(0) = \mathbf{R}(T)$  时,就要考虑到式(3.5.10)在  $t = T$  时是否成立。贝利<sup>[16]</sup>加了一个相因子:

$$\psi(t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \epsilon_n(t') dt'\right] e^{i\gamma_n(t)} |n; \mathbf{R}(t)\rangle \quad (3.5.11)$$

对于此,往往会提出问题:定义本征函数的式(3.5.3)并没有定出相因子,可以在等号两侧乘以一个相因子通过重新定义本征函数而把它吸收进去。为什么不能把式(3.5.11)中的  $e^{i\gamma_n(t)}$  吸收到  $|n; \mathbf{R}(t)\rangle$  中去呢?在研究了  $\gamma_n(t)$  的性质后才能真正明白这一点,从而理解贝利加进这个相因子是关键的一步。相  $\gamma_n$  就被称为“贝利相”,贝利诠释这个相是参数空间的几何性质。将式(3.5.11)代入式(3.5.4)就得到  $\dot{\gamma}_n(t)$  的方程:

$$\dot{\gamma}_n(t) = i\langle n; \mathbf{R} | \frac{\partial}{\partial t} n; \mathbf{R} \rangle = i\dot{\mathbf{R}}(t) \cdot \langle n; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} \rangle \quad (3.5.12)$$

最后,等式的根据是  $|n; \mathbf{R}\rangle$  只通过  $\mathbf{R}(t)$  依赖时间。 $\nabla_{\mathbf{R}}$  代表对  $\mathbf{R}$  取的梯度。正如式(3.5.8)所示,  $\langle n; \mathbf{R} | \frac{\partial}{\partial t} n; \mathbf{R} \rangle$  是纯虚数,因而  $\dot{\gamma}_n$  为实数,即只要  $\gamma_n$  的初始值为实数,它就一直保持为实数。它是个相角。令

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}(t)) \equiv i\langle n; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} \rangle \quad (3.5.13)$$

式(3.5.12)即变为

$$\dot{\gamma}_n(t) = \dot{\mathbf{R}}(t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) \quad (3.5.14)$$

贝利提出问题:令  $\mathbf{R}(t)$  随时间慢变化从  $\mathbf{R}(0)$  变到  $\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$ ,即经一周期回到初始值,

是否  $\gamma_n(T)$  也回到初始值  $\gamma_n(0)$ ? 计算一下, 有

$$\begin{aligned}\gamma_n(T) - \gamma_n(0) &= \int_0^T dt \dot{\gamma}_n(t) = \int_0^T dt \dot{\mathbf{R}}(t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R}) \\ &= \oint_C d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R})\end{aligned}$$

此处  $C$  是  $\mathbf{R}(t)$  从 0 到  $T$  回到初始值所描述的封闭路径。用斯托克斯定理, 并记沿  $C$  的这个封闭积分为  $\gamma_n(C)$ , 有

$$\gamma_n(C) = \int_S d\mathbf{S} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathbf{A} = i \int_S d\mathbf{S} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} \times \langle n; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} \rangle \quad (3.5.15)$$

这就是贝利相。  $S$  为  $C$  所围出的表面。一般情况  $\mathbf{A}$  不是无旋的, 因此封闭积分不为 0, 即  $\gamma_n(T) \neq \gamma_n(0)$ , 或  $\int_{\mathbf{R}_1}^{\mathbf{R}_2} d\mathbf{R} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{R})$  与路径有关。  $\gamma_n(t)$  是不可积的, 它不能表示为  $\mathbf{R}$  的函数。

由于  $|n; \mathbf{R}\rangle$  只通过  $\mathbf{R}$  和  $t$  有关, 因此它不能把相因子  $e^{i\gamma_n(t)}$  吸收进去。这说明了在式(3.5.11)中包括相因子的必要性。因式(3.5.15)  $\gamma_n(C)$  的值不依赖  $\mathbf{R}$  完成封闭路径所需的时间(只要足够长以满足绝热近似), 所以贝利称之为“几何相”, 这是和动力学相  $-\frac{1}{\hbar} \int_0^T \epsilon_m(t) dt$  对应的。这个几何相是参数空间的性质。  $\mathbf{R}$  可以是体系的任何慢变量。封闭积分是沿抽象参数空间进行的。与此形成对照的, 阿哈罗诺夫-玻姆相以封闭积分  $-\frac{ie}{\hbar e} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S}$  表示, 因此是实空间的几何相。

式(3.5.13)定义了一个矢量函数, 符号  $\mathbf{A}$  不是偶然使用的。考虑将  $|n; \mathbf{R}\rangle$  的相做一改变:

$$|n; \mathbf{R}\rangle \rightarrow e^{i\Theta(\mathbf{R})} |n; \mathbf{R}\rangle \quad (3.5.16)$$

则相应的改变有

$$\begin{aligned}|\nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R}\rangle &\rightarrow (i\nabla_{\mathbf{R}}\Theta) e^{i\Theta(\mathbf{R})} |n; \mathbf{R}\rangle + e^{i\Theta(\mathbf{R})} |\nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R}\rangle, \\ \mathbf{A} &\rightarrow -\nabla_{\mathbf{R}}\Theta + i\langle n; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} \rangle = \mathbf{A} - \nabla_{\mathbf{R}}\Theta\end{aligned} \quad (3.5.17)$$

式(3.5.16)和式(3.5.17)正是一种规范变换。由于  $\gamma_n(C)$  和  $\nabla \times \mathbf{A}$  相关(见式(3.5.15)), 在这一变换中它是不变量。这也是相位成为可观测量的必要条件。  $\mathbf{A}$  和  $\nabla \times \mathbf{A}$  相应地是一种规范连络和曲率。从式(3.5.12)可知,  $\langle n; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} \rangle$  也是纯虚数。式(3.5.13)和式(3.5.15)给出

$$\begin{aligned}\gamma_n(C) &= i \int_S \nabla_{\mathbf{R}} \times \langle n; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} \rangle \cdot d\mathbf{S} \\ &= -\text{Im} \int \nabla_{\mathbf{R}} \times \langle n; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} \rangle \cdot d\mathbf{S} \\ &= -\text{Im} \int \langle \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} | \times | \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} \rangle \cdot d\mathbf{S} \\ &= -\text{Im} \int \sum_{m \neq n} \langle \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} | m; \mathbf{R} \rangle \times \langle m; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} \rangle \cdot d\mathbf{S}\end{aligned} \quad (3.5.18)$$

写出最后一个等式时插入了  $\sum_m |m; \mathbf{R}\rangle \langle m; \mathbf{R}| = 1$ 。求和只包括  $m \neq n$ , 是因为  $\langle n; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} \rangle$  为纯虚数, 故有  $\text{Im} \langle \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} | n; \mathbf{R} \rangle \times \langle n; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} \rangle = 0$ 。

对本征方程  $h |n; \mathbf{R}\rangle = \epsilon_n(\mathbf{R}) |n; \mathbf{R}\rangle$  取  $\nabla_{\mathbf{R}}$ , 有

$$\nabla_R h |n; \mathbf{R}\rangle + h | \nabla_R n; \mathbf{R}\rangle = \nabla_R \epsilon_n |n; \mathbf{R}\rangle + \epsilon_n | \nabla_R n; \mathbf{R}\rangle$$

在等号左侧乘以  $\langle m; \mathbf{R} |$  并利用本征函数的正交性 ( $m \neq n$ , 非简并), 得

$$\langle m; \mathbf{R} | \nabla_R h |n; \mathbf{R}\rangle + \langle m; \mathbf{R} | h | \nabla_R n; \mathbf{R}\rangle = \epsilon_n \langle m; \mathbf{R} | \nabla_R n; \mathbf{R}\rangle$$

即

$$\langle m; \mathbf{R} | \nabla_R n; \mathbf{R}\rangle = \frac{\langle m; \mathbf{R} | \nabla_R h |n; \mathbf{R}\rangle}{\epsilon_n(\mathbf{R}) - \epsilon_m(\mathbf{R})} \quad (3.5.19)$$

将式(3.5.19)代入式(3.5.18), 即将  $\gamma_n(C)$  用  $\nabla h$  的矩阵元表示:

$$\begin{aligned} \gamma_n(C) &= - \int d\mathbf{S} \cdot \text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n; \mathbf{R} | \nabla_R h(\mathbf{R}) | m; \mathbf{R}\rangle \times \langle m; \mathbf{R} | \nabla_R h(\mathbf{R}) | n; \mathbf{R}\rangle}{[\epsilon_m(\mathbf{R}) - \epsilon_n(\mathbf{R})]^2} \\ &\equiv - \int d\mathbf{S} \cdot \text{Im} \mathbf{V}(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (3.5.20)$$

贝利的贡献在于证明了在循环绝热过程中不可积相因子的存在, 并提示了它的几何意义。考虑贝利给出的二能级系统的例子, 它的哈密顿量是  $2 \times 2$  矩阵:

$$\mathbf{h} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} R_3 & R_1 - iR_2 \\ R_1 + iR_2 & -R_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{R}$$

将哈密顿量对角化后给出本征值:

$$E_+(\mathbf{R}) = -E_-(\mathbf{R}) = \frac{1}{2} (R_1^2 + R_2^2 + R_3^2)^{1/2} = \frac{1}{2} R$$

容易看出在  $R=0$  时出现了偶然简并,  $E_+(0) = E_-(0) = 0$ 。从  $\mathbf{h}$  的表达式得出  $\nabla \mathbf{h} = \boldsymbol{\sigma} / 2$ ,  $\mathbf{V}(\mathbf{R}) = \mathbf{R} / 2R^3$ 。在此情况下,  $\mathbf{V}$  是在偶然简并发生时参数空间  $R=0$  处的一个磁单极所产生的磁场。 $\gamma_C$  就是参数空间中  $\mathbf{R}$  的循环变化一周期描绘的封闭曲线所围面积上通过的磁通量, 它正比于封闭曲线在  $R=0$  处所张的立体角。最后考虑贝利的观点对玻恩-奥本海默近似的修正。现在不再对慢变量  $\mathbf{R}$  规定既定的变化  $\mathbf{R}(t)$ , 而将它作为力学量处理, 总体系的波函数是

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi(\mathbf{R}) |n; \mathbf{R}\rangle \quad (3.5.21)$$

将它代入

$$H\Psi = \left[ \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \right] \Psi = E\Psi \quad (3.5.22)$$

并用式(3.5.3)

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \right] |n; \mathbf{R}\rangle = \epsilon_n(\mathbf{R}) |n; \mathbf{R}\rangle$$

即得到

$$- \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \psi(\mathbf{R}) |n; \mathbf{R}\rangle + \psi(\mathbf{R}) \epsilon_n(\mathbf{R}) |n; \mathbf{R}\rangle = E\psi(\mathbf{R}) |n; \mathbf{R}\rangle \quad (3.5.23)$$

将第一项算出, 整式用  $\langle n; \mathbf{R} |$  左乘, 得

$$\begin{aligned} - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \psi(\mathbf{R}) - \frac{\hbar^2}{2M} 2 \langle n; \mathbf{R} | \nabla_R n; \mathbf{R}\rangle \cdot \nabla_R \psi(\mathbf{R}) - \frac{\hbar^2}{2M} \psi(\mathbf{R}) \langle n; \mathbf{R} | \nabla_R^2 n; \mathbf{R}\rangle + \\ \epsilon_n(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{R}) = E\psi(\mathbf{R}) \end{aligned}$$

再用  $\frac{1}{2M}(\mathbf{P} - \hbar \mathbf{A})^2$  的具体形式, 上式可以写作如下形式:

$$\left[ \frac{1}{2M} (\mathbf{P} - \hbar \mathbf{A})^2 + \mathcal{V}(\mathbf{R}) \right] \psi(\mathbf{R}) = E \psi(\mathbf{R}) \quad (3.5.24)$$

其中

$$\mathcal{V}(\mathbf{R}) = \epsilon_n(\mathbf{R}) + \frac{\hbar^2}{2M} (\langle \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} n; \mathbf{R} \rangle - \mathbf{A}^2) \quad (3.5.25)$$

式(3.5.24)是慢变量波函数的薛定谔能量本征方程。为慢变量运动提供有效势能 $\mathcal{V}(\mathbf{R})$ 的主要是快运动的能量本征值 $\epsilon_n(\mathbf{R})$ ,  $\frac{\hbar^2}{2M}$ 是修正项。和过去教科书中推导结果的不同之处在于 $\mathbf{A}$ 的存在<sup>①</sup>。如果把 $\gamma_n$ “吸收”到本征函数 $|n; \mathbf{R}\rangle$ 内,使它在任何时间 $t$ 都能为实数, $\mathbf{A}$ 就为0。但上文已经分析过,在一般情况下这是不可能的。

容易验证 $\mathcal{V}(\mathbf{R})$ 即式(3.5.25)在式(3.5.16)和式(3.5.17)所示的变换下是不变的。因此只要要求 $\psi(\mathbf{R}) \rightarrow e^{-i\theta} \psi(\mathbf{R})$ 就能使方程(3.5.24)不变。 $\psi(\mathbf{R})$ 的这个相变换和 $|n; \mathbf{R}\rangle$ 的相变换(式(3.5.16))的相角正好反号。它们使体系总波函数 $\Psi = \psi(\mathbf{R}) |n; \mathbf{R}\rangle$ 在变换中不变。

如果本征态有简并,则相应的同一个 $\epsilon_n$ 还有以 $a, b, \dots$ 标出的若干状态。其结果是连络以矩阵元形式出现:

$$\mathbf{A}_{ab} = i \langle n, a; \mathbf{R} | \nabla n, b; \mathbf{R} \rangle \quad (3.5.26)$$

其相应的场强则是

$$\mathbf{B}_{ab} = \nabla \times \mathbf{A}_{ab} + i(\mathbf{A} \times \mathbf{A})_{ab} \quad (3.5.27)$$

和非阿贝尔规范场相对应<sup>[17-19]</sup>。

阿哈罗诺夫-玻姆相出现之后25年,贝利相的出现情况有一些类似。贝利相在物理学各个分支中的体现已经有很多报道。

自从贝利提出几何相以来,在物理学的许多领域都发现了它的存在,并进行了大量的研究工作。有趣的是:早在1956年S. Pancharatnam在光的偏振研究方面,1963年和1976年G. Herzberg和H. C. Longuet-Higgins在分子结构研究方面,1979年C. A. Mead和D. E. Truhlar在玻恩-奥本海默近似研究方面都有过存在几何相的结论。A. Shapere和F. Wilczek主编的*Geometric Phases in Physics*<sup>[20]</sup>一书包含评述性的章节和关于在物理学各分支中几何相的研究。

当循环过程并不是很慢时,可以对绝热近似做高阶修正<sup>[21]</sup>。

### 3.6 阿哈罗诺夫-阿南丹相

1987年阿哈罗诺夫和阿南丹(Anandan)<sup>[22]</sup>研究了循环演化一般条件下量子力学态的几何相。一个物理体系的状态随时间变化,在一段演化时间 $\tau$ 后回到原来的状态,称为“循环演化”。在量子力学中循环演化的始末态矢量之间的关系是

$$| \psi(\tau) \rangle = e^{i\phi} | \psi(0) \rangle \quad (3.6.1)$$

相因子 $e^{i\phi}$ 可以有可观效应。在希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 中, $\psi(\tau)$ 与 $\psi(0)$ 在 $\phi \neq 0$ 时并不是同一

<sup>①</sup> 该观点最早由C. A. Mead和D. G. Truhlar在玻恩-奥本海默近似中提出,其认为电子波函数的非完整性可以用在(包括规范势描述的)有效核哈密顿量中,是(Journal of Chemical Physics, 1979, 70: 2284)。

矢量,故态矢的循环演化在  $\mathcal{H}$  中描出的路径  $C$  并不是封闭的。 $\mathcal{H}$  的投影希尔伯特空间  $\mathcal{P}$  不区分  $|\psi\rangle$  与  $e^{if}|\psi\rangle$  ( $f$  为实数),因此  $|\psi(\tau)\rangle$  与  $|\psi(0)\rangle$  在  $\mathcal{P}$  中是同一个矢量,而循环演化在  $\mathcal{P}$  中所描述的路径  $\hat{C}$  是封闭的。用  $\mathcal{P}$  描述循环演化是更方便的。设  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  在哈密顿量  $H(t)$  的驱动之下按薛定谔方程演化:

$$H(t)|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \quad (3.6.2)$$

并在时间  $\tau$  完成一个循环。 $|\psi(t)\rangle$  与  $|\psi(0)\rangle$  的关系由式(3.6.1)给出。定义

$$|\tilde{\psi}(t)\rangle = e^{-if(t)} |\psi(t)\rangle \quad (3.6.3)$$

因此有

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}(\tau)\rangle &= e^{-if(\tau)} |\psi(\tau)\rangle = e^{-i[f(\tau)-\phi]} |\psi(0)\rangle \\ &= e^{-i[f(\tau)-f(0)-\phi]} |\tilde{\psi}(0)\rangle \end{aligned} \quad (3.6.4)$$

如果要求

$$f(\tau) - f(0) = \phi \quad (3.6.5)$$

就有

$$|\tilde{\psi}(\tau)\rangle = |\tilde{\psi}(0)\rangle \quad (3.6.6)$$

$|\tilde{\psi}(t)\rangle$  就是  $\mathcal{P}$  中的矢量,它在一个循环中描绘出一个封闭曲线。将式(3.6.3)代入式(3.6.2)就能求出  $f(t)$  所满足的方程:

$$H|\psi\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} e^{if} |\tilde{\psi}\rangle = -\hbar \frac{df}{dt} e^{if} |\tilde{\psi}\rangle + i\hbar e^{if} \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}\rangle$$

左乘以  $\frac{1}{\hbar} \langle\psi| = \frac{1}{\hbar} e^{-if} \langle\tilde{\psi}|$  并移项,得<sup>①</sup>

$$-\frac{df}{dt} = \frac{1}{\hbar} \langle\psi| H |\psi\rangle - \langle\tilde{\psi}| i \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}\rangle \quad (3.6.7)$$

$$\phi = f(\tau) - f(0) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau \langle\psi| H |\psi\rangle dt + \int_0^\tau \langle\tilde{\psi}| i \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}\rangle dt \quad (3.6.8)$$

在确定贝利相时需把动力学相去掉。对于定态,动力学相是  $-\frac{1}{\hbar} Et$ ; 对于绝热定态,它是  $-\frac{1}{\hbar} \int_0^t E(t') dt'$ 。现在考虑的是一般情况,动力学相是

$$\phi_d(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t \langle\psi(t')| H |\psi(t')\rangle dt' \quad (3.6.9)$$

式(3.6.8)等号右侧的第一项正是  $\phi_d(\tau)$ ,因此第二项就是循环演化的几何相  $\beta$ ,有

$$\beta = \int_0^\tau \langle\tilde{\psi}| i \frac{d}{dt} |\tilde{\psi}\rangle dt \quad (3.6.10)$$

这个几何相是普适的,意思是对于投影到  $\mathcal{P}$  中一个封闭路径  $\hat{C}$  的无穷多的  $\mathcal{H}$  中的循环演化路径  $C$ ,对应无穷多的  $H(t)$ ,它们的驱动状态沿着  $C$  演化,几何相式(3.6.10)是唯一的。它被称为“阿哈罗诺夫-阿南丹相”。

<sup>①</sup> 和绝热情况  $\phi_d = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E(t') dt'$  相比, $E(t)$  是绝热能量。在一般情况下将  $E(t')$  替换为  $\langle\psi(t')| H |\psi(t')\rangle$ 。

### 3.7 贝利相的实验显现

贝利相的出现分为两类情况：一类是参数  $\mathbf{R}$  能在实验中控制, 这种情况可以通过不同相的状态间的干涉测出贝利相; 另一类情况是,  $\mathbf{R}$  是更大体系的力学量, 例如在分子结构的玻恩-奥本海默近似中, 就需要将实测的本征值与式(3.5.24)和式(3.5.25)的理论结果相比较, 反过来对贝利相的存在做出判断。以下只讨论第一种情况。

贝利<sup>[16]</sup>分析了粒子自旋慢变化一个循环后出现的几何相。自旋为  $S$  的粒子与慢变化的磁场  $\mathbf{B}$  相互作用, 其哈密顿量是

$$h(\mathbf{B}) = \kappa \hbar \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} \quad (3.7.1)$$

$\kappa$  是与回转磁比值有关的常数,  $\hat{\mathbf{S}}$  是自旋算符。其能量本征值是

$$E_n(\mathbf{B}) = \kappa \hbar B n \quad (3.7.2)$$

$n$  是自旋在  $\mathbf{B}$  方向的投影, 取值自  $-S$  到  $S$ ,  $-S \leq n \leq S$ 。式(3.5.18)给出贝利相

$$\gamma_n(C) = - \int d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V}_n \quad (3.7.3)$$

其中  $\mathbf{V}_n$  是

$$\mathbf{V}_n = \text{Im} \frac{1}{B^2} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n; \mathbf{B} | \hat{\mathbf{S}} | m; \mathbf{B} \rangle \times \langle m; \mathbf{B} | \hat{\mathbf{S}} | n; \mathbf{B} \rangle}{(m - n)^2} \quad (3.7.4)$$

为了计算上式的矩阵元, 将  $B$  的方向定为  $z$  轴, 并用

$$\begin{aligned} (\hat{S}_x \pm i\hat{S}_y) | n \rangle &= [s(s+1) - n(n \pm 1)]^{\frac{1}{2}} | n \pm 1 \rangle, \\ \hat{S}_z | n \rangle &= n | n \rangle \end{aligned} \quad (3.7.5)$$

在计算  $V_{nx}$  和  $V_{ny}$  时, 因矢量积都涉及  $\hat{S}_z$  的矩阵元, 而  $\hat{S}_z$  的非对角矩阵元 ( $m \neq n$ ) 为 0, 所以  $V_{nx} = V_{ny} = 0$ 。当计算  $V_{nz}$  时, 只有  $m = n \pm 1$  才有贡献。因此有

$$\begin{aligned} V_{nz}(\mathbf{B}) &= \text{Im} \frac{1}{B^2} [\langle n | \hat{S}_x | n+1 \rangle \langle n+1 | \hat{S}_y | n \rangle - \langle n | \hat{S}_y | n+1 \rangle \langle n+1 | \hat{S}_x | n \rangle + \\ &\quad \langle n | \hat{S}_x | n-1 \rangle \langle n-1 | \hat{S}_y | n \rangle - \langle n | \hat{S}_y | n-1 \rangle \langle n-1 | \hat{S}_x | n \rangle] = \frac{n}{B^2} \end{aligned} \quad (3.7.6)$$

在一般坐标轴取向情况下, 有

$$\mathbf{V}_n(\mathbf{B}) = n \frac{\mathbf{B}}{B^3} \quad (3.7.7)$$

因此

$$\gamma_n(C) = - \int d\mathbf{S} \cdot \mathbf{V}_n = -n\Omega(C) \quad (3.7.8)$$

在  $\mathbf{B}(B_x, B_y, B_z)$  参数空间中,  $\int d\mathbf{S} \cdot \frac{\mathbf{B}}{B^3}$  正是  $\mathbf{B}$  描述一个封闭曲线  $C$  在空间原点处所张的立体角  $\Omega(C)$ 。贝利相因子是  $e^{i\gamma_n(C)} = e^{-in\Omega(C)}$ 。这是自旋随着磁场(通过磁矩与磁场相互作用)慢变化一个周期产生的几何相, 且它和  $n$  成正比。在实验上如果能制备粒子作为两个

不同  $n$  值的叠加态,则两部分的贝利相不同,发生干涉就能使贝利相显现。

### 3.7.1 光子贝利相的量子干涉现象

乔瑞宇和吴泳时<sup>[23]</sup>建议采用绕成螺旋形的光纤(图 3.17)。光沿光纤传播,其波矢  $\mathbf{k}$  连续变化。当光纤方向再次回到初始值时, $\mathbf{k}(k_x, k_y, k_z)$  空间中的代表矢量在球面上描出一个圆。如果这个圆在原点处张成一个圆锥,半顶角为  $\theta$ ,则它所张的立体角为

$$\Omega(C) = 2\pi(1 - \cos\theta) \quad (3.7.9)$$

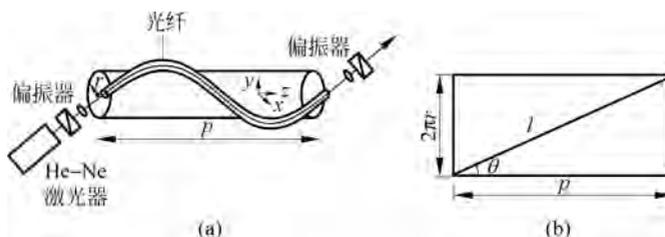


图 3.17 光在螺旋光纤中的贝利相

(a) 螺旋光纤实验示意图; (b) 打开圆柱面上的光纤路径

由于光子没有质量,保证了自旋沿  $\mathbf{k}$  方向  $s_k$  只能为  $+1$  或  $-1$ 。由于自旋跟随  $\mathbf{k}$  慢变化,完成一循环时的贝利相是

$$\gamma(C) = -2\pi s_k (1 - \cos\theta) \quad (3.7.10)$$

富田(Tomita)和乔瑞宇在此基础上进行了实验<sup>[24]</sup>。如图 3.17(a)所示,He-Ne 激光经线偏振器进入光纤,线偏振是  $s_k = +1$  与  $s_k = -1$  的等量叠加。通过光纤后  $\mathbf{k}$  恢复最初方向,两种偏振间由于贝利相符号相反有了相差,致使合成的线偏振方向有所改变。均匀缠绕的螺旋线在打开了的圆柱面上如图 3.17(b)中斜线所示。光纤长为  $l$ ,圆柱长为  $p$ ,光纤方向与螺旋轴(圆柱轴)方向的夹角为  $\theta$ ,称为“顶角”(apex angle),则有

$$\cos\theta = \frac{p}{l} \quad (3.7.11)$$

因此

$$\gamma(C) = -2\pi s_k \left(1 - \frac{p}{l}\right) \quad (3.7.12)$$

在实验中也采取了不同绕制光纤的几何条件。实验结果示于图 3.18。线偏振的旋转角与立体角成线性关系,和理论值符合得很好。曲线上不同形状的点代表不同绕制的几何条件,即均匀的和不同程度的非均匀绕制,这是为了验证在参数空间中封闭路径连续扭曲时  $\gamma(C)$  是否始终与  $\Omega(C)$  成正比。该验证是对贝利相的第一个实验验证。

采用光子进行实验是很巧妙的。由于光子是玻色子(Bose),所以对于个别光子的实验可以通过大量光子流来实现。光子自旋跟随动量循环出现

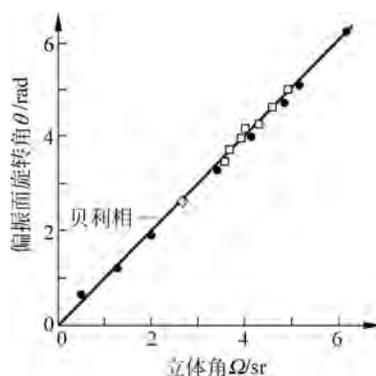


图 3.18 偏振旋转角与立体角  $\Omega(C)$  关系

几何相的现象可以用经典物理的观点解释。偏振方向的旋转相当于在传播方向慢变化时,光波电矢量的平行输运产生的角度非完整,这只要通过麦克斯韦方程组(Maxwell's equations)就能得到<sup>[25]</sup>。因此,这个现象可以理解为一个在过渡到经典情况( $\hbar \rightarrow 0$ )后仍能存在的量子现象。

### 3.7.2 螺旋磁场中中子自旋旋转的贝利相实验

T. Bitter 和 D. Dubbers<sup>[26]</sup>进行了中子自旋慢旋转产生贝利相的测量。如何使中子能处于一个慢旋转的磁场中呢?办法是让中子通过一个在空间按螺旋变化的磁场,这时中子

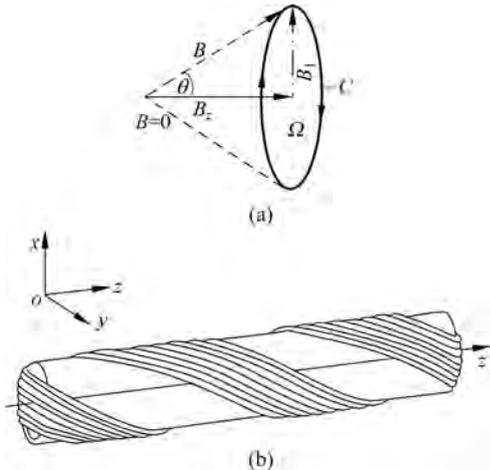


图 3.19 磁场矢量  $\mathbf{B}$  沿封闭曲线  $C$  的输运  
(a) 原理图; (b) 产生  $\mathbf{B}_1$  的螺旋线圈

所看见的就是随时间旋转的磁场。中子通过其磁矩与磁场的耦合使其自旋跟上慢变化,完成一个循环后就产生了贝利相。图 3.19(a)给出了磁场矢量  $\mathbf{B}$  沿封闭曲线  $C$  的绝热输运。图 3.19(b)给出了产生在  $xy$  平面旋转的磁场分量  $\mathbf{B}_1$  的螺旋线圈,另有线圈产生  $B_z$ 。令中子在  $t=0$  处于状态  $|m\rangle$ ,  $m$  为自旋  $z$  的分量。令  $T$  代表  $\mathbf{B}_1$  转一周的时间(中子通过  $\mathbf{B}_1$  在空间转一周的距离所需的时间),在此时间内中子的动力学相是

$$\phi_d = \kappa \int_0^T B(t) dt = \kappa BT$$

根据式(3.7.8),贝利相的相位是  $-2\pi(1 - \cos\theta)$ ,由此得到总相位  $\Phi_T$  是<sup>①</sup>

$$\Phi_T = \kappa BT - 2\pi(1 - \cos\theta) \quad (3.7.13)$$

上式等号右侧两项分别为动力学相和贝利相。实验是用 Grenoble 的 Laue-Langevin 研究所反应堆提供的中子(可以得到极化束)进行的。令  $P_\alpha(0)$  和  $P_\beta(T)$  代表中子在  $t=0$  和  $T$  时的极化分量;  $\alpha, \beta = x, y, z$ 。实验测出的始末态极化用

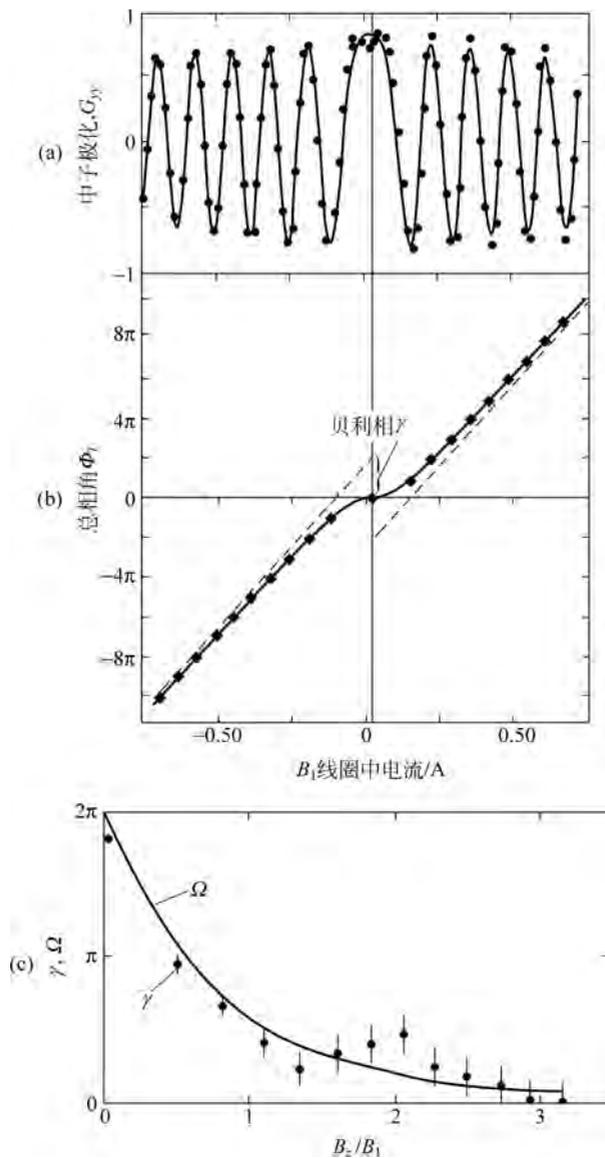
$$P_\beta(T) = G_{\beta\alpha} P_\alpha(0)$$

确定系数  $G_{\beta\alpha}$  并和 Dubbers 的理论结果比较<sup>[27]</sup>。

在  $B_z=0$ (此时  $\theta=\pi/2, \gamma=-2\pi$ )时测出的  $G_{yy}$  示于图 3.20(a),从数据得出的  $\Phi_T$  和理论比较示于图 3.20(b)。定出的  $\gamma$  值为  $2\pi$ ,在  $B_z \neq 0$  时定出的贝利相  $\gamma$  和立体角  $\Omega$  的比较示于图 3.20(c)。

D. J. Richardson, A. I. Kilvington, K. Green 和 S. K. Lamoreaux<sup>[28]</sup>所进行的正好是一个“互补”的实验。用 Laue-Langevin 研究所反应堆的极化超冷中子在旋转磁场中进行实验。超冷中子是速度  $\leq 5\text{m/s}$  的中子,对它们可以用“瓶子”来装。因为 Be 或 BeO 表面的费米势很高,以任何角度入射到表面的超冷中子几乎都会被反射。只要表面足够纯,储藏时间就是中子衰变寿命量级。他们验证了贝利相与参数空间( $\mathbf{B}$ )的立体角关系,此外,还验证了多次循环的贝利相的相加性。

① 参考文献[26]和文献[27]在定义相角时把  $m$  作因子提出,在 3.7.2 节中均依此定义。

图 3.20 横向自旋在螺旋场  $B_1$  中的旋转

(a) 中子极化; (b) 总相角和贝利相; (c) 贝利相  $\gamma$  的理论(曲线)与实验(点)的比较

### 3.7.3 自旋绝热旋转造成的核四极共振频率分裂

R. Tycho<sup>[29]</sup> 报道了一项核自旋的绝热旋转造成的核四极共振频率分裂研究, 验证了贝利相。他选择了  $\text{NaClO}_3$  单晶,  $^{35}\text{Cl}$  核自旋为  $s=3/2$ 。自旋以晶体对称轴(记为  $z'$ )取向。这是四极耦合, 其哈密顿量是

$$h = \omega_Q S_z^2 \quad (3.7.14)$$

式中,  $\omega_Q$  是表征耦合的参量。用射频脉冲激发,  $^{35}\text{Cl}$  核即处于不同  $S_z$  态的叠加态上。用在  $z$  轴方向绕制的螺线管线圈探测衰变信号得到核四极共振谱。不同的  $|S_z|$  值给出了两个能

级,共振只有一条谱线(约 29.94MHz)。如图 3.21 所示,使晶体对称轴  $z'$  与  $z$  轴成  $\theta$  角,并将晶体沿  $z$  轴以角频率  $\omega_R$  慢速旋转( $\omega_R \ll \omega_Q$ ),  $S_{z'}$  随时间的变化是

$$S_{z'}(t) = S_z \cos\theta + S_x \sin\theta \cos\omega_R t + S_y \sin\theta \sin\omega_R t \quad (3.7.15)$$

$$H(t) = \omega_Q S_{z'}^2(t) \quad (3.7.16)$$

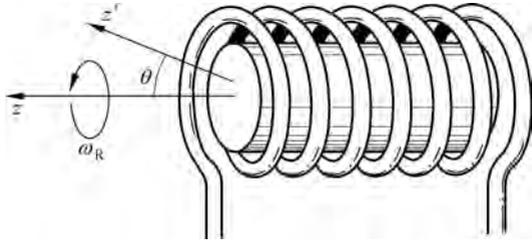


图 3.21 自旋绝热旋转导致核四极共振劈裂实验示意图

用  $S_{z'}$  本征态表示的与时间有关的一组基是:

$$\begin{aligned} |a\rangle &= \left| \frac{3}{2} \right\rangle, \\ |b\rangle &= \cos \frac{\xi}{2} \left| \frac{1}{2} \right\rangle - \sin \frac{\xi}{2} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle, \\ |c\rangle &= \sin \frac{\xi}{2} \left| \frac{1}{2} \right\rangle + \cos \frac{\xi}{2} \left| -\frac{1}{2} \right\rangle, \\ |d\rangle &= \left| -\frac{3}{2} \right\rangle \end{aligned} \quad (3.7.17)$$

此处

$$\tan \xi = 2 \tan \theta$$

考虑到算符  $S_{z'}$  和它的某些本征态与  $\theta$  有关,贝利相写作

$$\beta = 2\pi \int_0^\theta d\theta' \sin\theta' \langle \psi | S_{z'} | \psi \rangle \quad (3.7.18)$$

对式(3.7.17)各态,相应的贝利相是

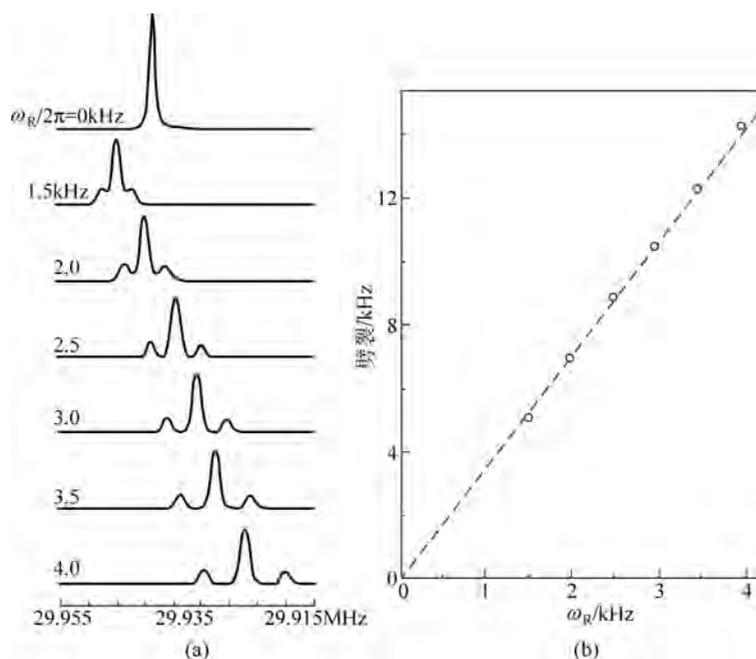
$$\begin{aligned} \beta_a &= 3\pi(\cos\theta - 1), \\ \beta_b &= -\pi[(4 - 3\cos^2\theta)^{1/2} - 1], \\ \beta_c &= \pi[(4 - 3\cos^2\theta)^{1/2} - 1], \\ \beta_d &= -3\pi(\cos\theta - 1) \end{aligned} \quad (3.7.19)$$

实验在  $\cos^2\theta = 1/3$  条件下进行。这样可能的相差就是  $-2\sqrt{3}\pi, 0, 2\sqrt{3}\pi \pmod{2\pi}$ 。考虑两个本征态  $|\psi_1\rangle$  和  $|\psi_2\rangle$ , 在  $t=0$  时由射频脉冲产生。在时间  $T = 2\pi/\omega_R$  后,两个态间的相对贝利相相差是  $\gamma_1 - \gamma_2$ 。但这个相差是随时间连续积累的,也就相当于频移

$$\Delta\omega = \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{2\pi} \omega_R \quad (3.7.20)$$

这样,原来的一条共振谱线就分裂成三条,  $\Delta\omega$  分别为  $-\sqrt{3}\omega_R, 0, \sqrt{3}\omega_R$ 。实验结果证实了这个分析。图 3.22(a) 是谱线随  $\omega_R$  的变化,谱线的总体移动是因样品温度变化造成的。

图 3.22(b) 是两条边线频差随  $\omega_R$  的变化,直线的斜率正是  $2\sqrt{3}$ 。

图 3.22  $^{35}\text{Cl}$  核四极共振劈裂

(a)  $^{35}\text{Cl}$  核四极共振谱随  $\omega_R$  的变化; (b) 两条边线频差劈裂与  $\omega_R$  的关系

## 参考文献

- [1] PESHKIN M, TONOMURA A. The Aharonov-Bohm effect[M]. Berlin: Springer-Verlag, 1989.
- [2] AHARONOV r, BOHM D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory[J]. Physical Review, 1959, 115: 485-491.
- [3] WU T T, YANG C N. Concept of nonintegrable phase factors and global formulation of gauge fields [J]. Physical Review D, 1975, 12: 3845-3857.
- [4] FEYNMAN R P, LEIGHTON R B, SANDS M. The Feynman lectures on physics: II-quantum mechanics[M]. Reading: Addison-Wesley, 1963.
- [5] BYERS N, YANG C N. Theoretical considerations concerning quantized magnetic flux in superconducting cylinders[J]. Physical Review Letters, 1961, 7: 46-49.
- [6] CHAMBERS R G. Shift of an electron interference pattern by enclosed magnetic flux[J]. Physical Review Letters, 1960, 5: 3-5.
- [7] MÖLLENSTEDT G, BAYH W. Kontinuierliche Phasenschiebung von Elektronenwellen im kraftfeldfreien Raum durch das magnetische Vektorpotential eines Solenoids[J]. Physikalische Blätter, 1962, 18(7): 299-305.
- [8] MÖLLENSTEDT G, BAYH W. Messung der kontinuierlichen Phasenschiebung von Elektronenwellen im kraftfeldfreien Raum durch das magnetische vektorpotential einer Luftspule[J]. Naturwissenschaften, 1962, 49: 81-82.
- [9] BAYH W. Messung der kontinuierlichen Phasenschiebung von Elektronenwellen im kraftfeldfreien Raum durch das magnetische Vektorpotential einer Wolfram-Wendel[J]. Zeitschrift für Physik, 1962, 169(492-510).

- 
- [10] TONOMURA A. Applications of electron holography[J]. *Reviews of Modern Physics*, 1987, 59: 639-669.
- [11] TONOMURA A, OSAKABE N, MATSUDA T, et al. Evidence for Aharonov-Bohm effect with magnetic field completely shielded from electron wave [J]. *Physical Review Letters*, 1986, 56: 792-795.
- [12] TONOMURA A, MATSUDA T, ENDO J, et al. Development of a field emission electron microscope [J]. *Journal of Electron Microscopy*, 1979, 28(1): 1-11.
- [13] AHARONOV Y, CASHER A. Topological quantum effects for neutral particles[J]. *Physical Review Letters*, 1984, 53: 319-321.
- [14] CIMMINO A, OPAT G I, KLEIN A G, et al. Observation of the topological Aharonov-Casher phase shift by neutron interferometry[J]. *Physical Review Letters*, 1989, 63: 380-383.
- [15] BERRY M. Anticipations of the geometric phase[J]. *Physics Today*, 1990, 43(12): 34.
- [16] BERRY M V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes[J]. *Proceedings of the Royal Society of London, A, Mathematical and Physical Sciences*, 1984, 392(1802): 45-57.
- [17] WILCZEK F, ZEE A. Appearance of gauge structure in simple dynamical systems[J]. *Physical Review Letters*, 1984, 52: 2111-2114.
- [18] MOODY J, SHAPERRE A, WILCZEK F. Realizations of magnetic-monopole gauge fields: Diatoms and spin precession[J]. *Physical Review Letters*, 1986, 56: 893-896.
- [19] JACKIW R. Angular momentum for diatoms described by gauge fields[J]. *Physical Review Letters*, 1986, 56: 2779-2780.
- [20] SHAPERRE A, WILCZEK F. *Geometric phases in physics*[M]. Singapore: World Scientific, 1989.
- [21] SUN C P. High-order quantum adiabatic approximation and Berry's phase factor [J]. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 1988, 21(7): 1595-1599.
- [22] AHARONOV Y, ANANDAN J. Phase change during a cyclic quantum evolution [J]. *Physical Review Letters*, 1987, 58: 1593-1596.
- [23] CHIAO R Y, WU Y S. Manifestations of Berry's topological phase for the photon [J]. *Physical Review Letters*, 1986, 57: 933-936.
- [24] TOMITA A, CHIAO R Y. Observation of Berry's topological phase by use of an optical fiber [J]. *Physical Review Letters*, 1986, 57: 937-940.
- [25] BERRY M V. Interpreting the anholonomy of coiled light [J]. *Nature*, 1987, 326(6110): 277-278.
- [26] BITTER T, DUBBERS D. Manifestation of Berry's topological phase in neutron spin rotation [J]. *Physical Review Letters*, 1987, 59: 251-254.
- [27] MUSKAT E, DUBBERS D, SCHÄRPF O. Dressed neutrons [J]. *Physical Review Letters*, 1987, 58: 2047-2050.
- [28] RICHARDSON D J, KILVINGTON A I, GREEN K, et al. Demonstration of Berry's phase using stored ultracold neutrons [J]. *Physical Review Letters*, 1988, 61: 2030-2033.
- [29] TYCKO R. Adiabatic rotational splittings and Berry's phase in nuclear quadrupole resonance [J]. *Physical Review Letters*, 1987, 58: 2281-2284.
- [30] SCHIFF L I. *Quantum mechanics*[M]. 3rd ed. New York: McGraw-Hill, 1968.
- [31] MARZLIN K P, SANDERS B C. Inconsistency in the application of the adiabatic theorem [J]. *Physical Review Letters*, 2004, 93: 160408.
- [32] TONG D M, SINGH K, KWEK L C, et al. Quantitative conditions do not guarantee the validity of the adiabatic approximation [J]. *Physical Review Letters*, 2005, 95: 110407.

## 第 4 章

# 量子力学与经典力学的界限, 缠绕与退相干

在量子力学教程中, 我们了解到量子力学是从原子和分子开始的微观世界的理论。作为更精确和更普遍的理论, 它也应对宏观世界适用, 而经典力学只是量子力学在涉及的作用量比  $\hbar$  大得多时的极限情况。从 1925 年量子力学初创时开始, 对如何能演示上叙情况一直存在激烈的讨论和争议, 更不用说去严格证明了。

从一个简单的问题说起。量子力学中谐振子本征态和经典振子的行为极度不同。量子力学的谐振子是否具有和经典振子相似的状态呢? 在 1926 年, 薛定谔从本征态构成了一个模拟经典振子往复运动的波包。在其鼓舞下, 他致力于从氢原子本征态构成一个模拟开普勒运动 (Kepler motion) 运动的波包。因为谐振子的能量状态是等间距的, 所以波包不扩散, 但氢原子却不是这样, 他并没有取得成功。考虑到氢原子的能级在量子数  $n$  越来越大时也越来越趋近等间距的情况, 在 20 世纪 70 年代中期构成了高激发态的氢原子圆轨道波包。它确实模拟了开普勒圆轨道运动, 但作为一个量子力学的客体, 这个波包要变宽并扩散。为了形成椭圆轨道波包, 需要找出能表征轨道形状的经典 Runge-Lenz 矢量的量子力学守恒量。研究者在 20 世纪 80 年代末期完成了这个任务, 构成了高激发的椭圆轨道波包。以上讨论将在 4.1 节, 4.2 节和 4.4 节详细介绍。

能不经解薛定谔方程就求出量子力学的能量本征态问题吗? 答案是肯定的, 只要能确切知道问题的动力学对称。对于氢原子, 这个对称是  $SO(4)$ 。在一些局限条件下可以用角动量算符和量子力学 Runge-Lenz 算符构成这个群的生成元。这样氢原子的束缚态能谱除一个乘数因子外就完全确定了。4.3 节将对此详细介绍。

量子力学中的线性叠加原理起着极为重要的作用。对微观世界, 它的推论是非常正确的。但对日常的经典现实, 这个原理能给出荒谬的结论。它允许在日常生活中永不能共存的状态叠加, 例如一只活猫和它自己的尸体叠加。它们不仅能同时存在, 还要能相互干涉。这就是有名的“薛定谔的猫”的理论。当叠加的各项代表宏观状态时, 必须存在某种机制能淬灭各项之间的干涉, 即使它们不再相干。这时就有状态的各种结局以相应的概率出现, 在经典意义上是完全可以接受的。几十年来, 退相干的机制始终是集中研究和争论的课题, 物理学家用模型演示这种机制, 逐渐取得共识的是影响退相干的根源是环境。在 4.5 节~4.8 节将介绍退相干机制和一个动力学退相干模型, 以及如何到达量子力学的经典极限。最后在 4.9 节中将讨论在实验室中实现的“薛定谔的猫”, 即将两个宏观可区别的状态相干地叠

加起来, 亦即宏观缠绕态。

从量子力学诞生起, 它和经典力学的关系就一直是热门研究的课题。早期的理解是, 经典力学适用于宏观客体, 粒子运动遵循确定的轨道。量子力学适用于微观客体, 其规律是概率性的。但作为物理学的基本规律, 量子力学也应适用于宏观客体。在这种情况下它应给出经典力学的规律作为它的极限情况。超流与超导的发现告诉人们, 某些宏观体系是服从量子力学规律的, 这将在第 6 章中探讨。至于量子力学如何在极限情况下归结为经典力学, 多年的研究已有不少成果, 近 10 年来又有新的发展。

量子力学中力学量的平均值随时间的变化给出, 在一维势  $V(x)$  中的质量为  $m$  的粒子, 其波函数为  $\psi$ <sup>①</sup>, 则其坐标的期待值  $\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi dx$  满足下式:

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle = - \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$

这就是埃伦费斯特定理。在形式上它和经典运动方程类似。但量子力学中坐标期待值的运动和由  $-\partial V/\partial x$  所决定的经典粒子运动只能在一定条件下才有相似之处。和经典粒子相似的是量子力学中的波包, 它的波函数  $\psi(x)$  只在  $\bar{x} = \langle x \rangle$  附近的小区域内才显著地不为 0,  $\bar{x}$  是波包中心的坐标。即使如此,  $\bar{x}$  的运动是否由经典方程

$$m \frac{d^2}{dt^2} \bar{x} = - \frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}}$$

给出? 即是否有  $\left. \left\langle \frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \right|_{\bar{x}} = \frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}}$ ? 在一般情况下, 双方是不相等的, 设  $V(x)$  是慢变函数, 将  $\frac{\partial V}{\partial x}$  在  $\bar{x}$  附近展开, 准确到  $\langle (x - \bar{x})^2 \rangle \equiv \langle \Delta x^2 \rangle$  项:

$$\frac{\partial V}{\partial x} = \frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}} + \frac{1}{2} \frac{\partial^3 V(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3} \langle \Delta x^2 \rangle$$

因此, 只有在

$$\left| \frac{\partial V(\bar{x})}{\partial \bar{x}} \right| \gg \frac{1}{2} \left| \frac{\partial^3 V(\bar{x})}{\partial \bar{x}^3} \right| \langle \Delta x^2 \rangle$$

时, 波包中心的运动才近似于经典粒子。但一般情况下波包总是要弥散的。即使在开始对上式成立, 随着时间的流逝也会失效, 波包中心的运动会越来越偏离经典运动。

我们将从薛定谔在 1926 年提出的谐振子波包开始, 在这里量子力学和经典力学的对应是直接的。然后讨论氢原子的量子力学波包, 这里它和经典开普勒轨道的相似和对应已经是不完全的了。除对应以外, 还有作为量子力学特点的波动性的明确显示。

量子力学与经典力学的一个基本差异是线性叠加原理。在从量子力学到经典力学过渡时, 是什么机制使叠加的各态间的相位关系丧失, 从而使这些态不再相干而只贡献独立的概率? 这个问题被称为“退相干问题”。除一般讨论外, 我们还将介绍 W. Zurek 提供的一个答案, 最后还将讨论实验室中实现的“薛定谔的猫”。

①  $\psi$  是  $x$  与  $t$  的函数, 在必要时会写出它对宗量的依赖。

## 4.1 薛定谔的谐振子波包,相干态

在创立量子力学的过程中,海森堡的观点是:类似电子轨道的这类概念应该完全否定,薛定谔却更多地考虑了量子力学和经典力学间的联系。量子力学中的一维谐振子是很好的例子。在低激发态,粒子的位置概率分布和经典分布差别极大,而当量子数  $n$  变得相当大时,量子力学分布逐渐接近经典分布,这是玻尔对应原理的体现。但能量本征态是定态,位置分布是和时间无关的。能否找到能模拟经典振子运动的量子力学的含时波函数?即能否找出能满足

$$\langle \Psi(t) | x | \Psi(t) \rangle = A \cos(\omega t + \alpha) \quad (4.1.1)$$

关系的波函数  $\Psi(x, t)$  呢? 这个问题是薛定谔在 1926 年解决的<sup>[1]</sup>,  $\Psi(x, t)$  应满足薛定谔方程

$$i \hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \Psi(x, t) \quad (4.1.2)$$

构成方程解的方法是:将  $\Psi(x, 0)$  用谐振子能量本征态展开,将展开的各项分别乘上相应的动力学相因子  $e^{-iE_n t/\hbar}$ , 结果就得到满足起始条件  $\Psi(x, 0)$  的方程式(4.1.2)的解。一维谐振子的能量本征函数和本征值是

$$\psi_n = C_n e^{-(m\omega/2\hbar)x^2} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad (4.1.3)$$

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (4.1.4)$$

此处  $C_n$  是归一化常数

$$C_n = 2^{-n/2} (n!)^{-1/2} \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \quad (4.1.5)$$

$H_n$  是埃尔米特多项式(Hermite polynomial)。将  $\Psi(x, 0)$  用  $\psi_n$  展开,有

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n C_n e^{-(m\omega/2\hbar)x^2} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad (4.1.6)$$

展开系数  $c_n$  由下式决定:

$$c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) \Psi(x, 0) dx \quad (4.1.7)$$

在时间  $t$  的波包就是

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t} \quad (4.1.8)$$

波包的中心坐标是

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} c_n^* c_k e^{-i(n-k)\omega t} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x) x \psi_k(x) dx \end{aligned}$$

记上式最后一行的积分为  $x_{nk}$ , 则上式可以写作

$$\langle x \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} c_n^* c_k x_{nk} e^{-i(n-k)\omega t} \quad (4.1.9)$$

用本征函数式(4.1.3)可算出

$$x_{nk} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[ \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{k,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{k,n+1} \right] \quad (4.1.10)$$

将式(4.1.10)代回式(4.1.9)得

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{n} (c_n^* c_{n-1} e^{i\omega t} + c_{n-1}^* c_n e^{-i\omega t}) \quad (4.1.11)$$

为了令  $\Psi(x, t)$  能够模拟经典运动式(4.1.1), 需对波包的初态  $\Psi(x, 0)$  做一些限制。令它的展开系数  $c_n = |c_n| e^{i\phi_n}$ , 令  $|c_n|$  随  $n$  缓慢变化,  $|c_n| \approx |c_{n-1}|$ ,  $\phi_{n-1} - \phi_n = \alpha$  与  $n$  无关, 并令  $c_n$  只在  $n$  较大的情况下才显著地不为 0 (因此  $E_n \approx n\hbar\omega$ ), 此时式(4.1.11)即变为

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \sqrt{\frac{2}{m\omega^2}} \left( \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{E_n} |c_n|^2 \right) \cos(\omega t + \alpha) \\ &= \sqrt{\frac{2}{m\omega^2}} \langle \sqrt{E} \rangle \cos(\omega t + \alpha) \end{aligned} \quad (4.1.12)$$

在以上推导中用了

$$\langle \sqrt{E} \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{E_n} |c_n|^2 \quad (4.1.13)$$

式(4.1.12)正是经典谐振子的轨道。

反过来再考虑式(4.1.8), 这是一个周期函数。在  $t$  为经典周期  $T = 2\pi/\omega$  或其整数倍时,  $\Psi(x, t_j) = \Psi(x, 0)$ 。波包并不随时间的变化而扩散。

上面构造的状态是一种相干态(coherent state)。在量子力学中这是一个重要概念, 在物理学许多领域都有应用<sup>[2]</sup>。以下对它做一个简单介绍。

#### 4.1.1 相干态的基本性质

相干态是希尔伯特空间  $\mathcal{H}$  的矢量  $|l\rangle$ , 其标记  $l$  一般是多分量的。相干态有不同的定义, 但它们之间有两点是共同的, 即连续性和完全性(单位元分解)。定义矢量  $|\psi\rangle$  的范数(norm)为  $\| |\psi\rangle \| \equiv \langle \psi | \psi \rangle^{\frac{1}{2}}$ 。对  $|l\rangle \neq 0$ ,  $\| |l\rangle \|$  为正实数。相干态的连续性是: 当标记  $l$  连续变化趋近  $l'$  时, 有  $\| |l'\rangle - |l\rangle \| \rightarrow 0$ 。这个条件决定了在一般情况下  $|l\rangle$  和  $|l'\rangle$  并不会因为  $l \neq l'$  而正交。连续性质决定了分立的正交矢量集  $\{|n\rangle: n=0, 1, 2, \dots\}$  不可能是相干态, 因为  $n$  标记不是连续的。此外, 归一为  $\delta$  函数的连续正交矢量  $\{|x\rangle: -\infty < x < \infty\}$  也不是相干态。虽然标记  $x$  是连续的, 但  $\langle x | x' \rangle = \delta(x - x')$  即矢量不是连续的: 当  $x$  连续地趋向  $x'$  时, 只要它们在  $x'$  的开邻域,  $\| |x'\rangle - |x\rangle \|$  就不连续趋向极限 0。因此, 通常的自伴随算符的本征矢量并不构成相干态集合。

相干态的完全性是: 存在正值的测度  $\delta l$ , 使得单位算符  $I$  可以分解为

$$I = \int |l\rangle \langle l| \delta l \quad (4.1.14)$$

积分是在标记空间  $\mathcal{L}(l \in \mathcal{L})$  中进行的。这个性质和自伴随算符本征矢量的完全性不同, 后

者自动满足正交归一态 $|n\rangle$ 的完全条件 $\sum_n |n\rangle\langle n| = I$ , 而相干态满足式(4.1.14)需要具体验证。如果式(4.1.14)得到满足, 它就诱导出希尔伯特空间 $\mathcal{H}$ 的一个表示, 称为“连续表示”。 $\mathcal{H}$ 中的矢量 $|\varphi\rangle$ 和算符 $B$ 可以表示为

$$|\varphi\rangle = \int |l\rangle\langle l|\varphi\rangle\delta l \quad (4.1.15)$$

$$\langle\varphi'|B|\varphi\rangle = \int\langle\varphi'|l'\rangle\langle l'|B|l\rangle\langle l|\varphi\rangle\delta l\delta l' \quad (4.1.16)$$

$\langle l|\varphi\rangle$ 和 $\langle l'|B|l\rangle$ 分别是矢量 $|\varphi\rangle$ 和算符 $B$ 在连续表示中的代表。对范数有限的矢量 $|\varphi\rangle$  ( $\langle\varphi|\varphi\rangle$ 为有限), 其连续表示的代表 $\langle l|\varphi\rangle$ 是平方可积的, 即 $\langle\varphi|\varphi\rangle = \int\langle\varphi|l\rangle\langle l|\varphi\rangle\delta l = \int|\langle l|\varphi\rangle|^2\delta l$ 为有限。连续表示的函数 $\langle l|\varphi\rangle$ 满足积分方程

$$\langle l|\varphi\rangle = \int\langle l|l'\rangle\langle l'|\varphi\rangle\delta l' \quad (4.1.17)$$

积分方程的核

$$\mathcal{K}(l; l') = \langle l|l'\rangle \quad (4.1.18)$$

称为“复制核”(reproducing kernel)。由于连续性条件, 核 $\langle l|l'\rangle$ 是联合连续的, 由于它在 $l=l'$ 时不为0, 因此在 $l$ 的开邻域中的所有 $l'$ 处都不为0。从 $\| |l\rangle - |l'\rangle \|^2 = \langle l'|l'\rangle + \langle l|l\rangle - 2\text{Re}\langle l'|l\rangle$ 看, 连续性条件和复制核的联合连续是互为因果的。这点和通常的基不同。对通常的基, 也有类似的积分方程。但由于正交归一性, 它变为一个平庸的等式, 不对函数给出任何限制, 而式(4.1.17)是函数的真实条件。和通常的基不同, 相干态是线性相关的:

$$|l'\rangle = \int |l\rangle\langle l|l'\rangle\delta l' \quad (4.1.19)$$

即任何相干态都可以表示为其他相干态的线性和或积分。因此, 相干态可以称为“过完全”(overcomplete)的态的一族。

最后, 我们注意到:

$$\| |l\rangle - |l'\rangle \|^2 = \langle l'|l'\rangle + \langle l|l\rangle - 2\text{Re}\langle l'|l\rangle$$

因此, 矢量的连续性是复制核的联合连续性的简单结果。

上述连续性和单位元分解的两个性质及其推论, 对各种相干态都适用。具体到某一类相干态, 还会有其特定的性质。

### 4.1.2 正则相干态

正则相干态是消灭算符 $a$ 和产生算符 $a^\dagger$ 生成的<sup>①</sup>。它们满足对易关系

$$[a, a^\dagger] = I \quad (4.1.20)$$

归一的基准态(或称“真空态”) $|0\rangle$ 满足

$$a|0\rangle = 0 \quad (4.1.21)$$

将 $a^\dagger$ 重复作用在 $|0\rangle$ 上得到的各态张成状态空间, 它的正交归一的基矢量为

<sup>①</sup> 请参阅量子力学教科书中有关二次量子化的内容。

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle \quad (4.1.22)$$

从对易关系式(4.1.20)可知,  $|n\rangle$  是数算符

$$N = a^\dagger a \quad (4.1.23)$$

的本征态, 相应的本征值是  $n$ :

$$N |n\rangle = n |n\rangle \quad (4.1.24)$$

$a$  和  $a^\dagger$  分别是减少和增加数本征值 1 个单位的算符:

$$\begin{aligned} Na |n\rangle &= (n-1)a |n\rangle, \\ Na^\dagger |n\rangle &= (n+1)a^\dagger |n\rangle \end{aligned} \quad (4.1.25)$$

正则相干态是在基准态  $|0\rangle$  上做么正变换得到的:

$$|z\rangle = e^{za^\dagger - z^* a} |0\rangle \quad (4.1.26)$$

量子力学中最有用的公式之一是 Baker-Campbell-Hausdorff 公式<sup>①</sup>:

$$e^{A+B} = e^A e^{-\frac{1}{2}[A,B]} e^B = e^B e^{\frac{1}{2}[A,B]} e^A \quad (4.1.27)$$

该公式的另一形式是

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \cdots + \frac{1}{n!} [A, [A, [\cdots [A, B] \cdots]]] + \cdots \quad (4.1.28)$$

如果  $[A, B]$  与  $A$  和  $B$  对易, 就有

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]} = e^B e^A e^{\frac{1}{2}[A,B]} \quad (4.1.29)$$

由于  $[za^\dagger, z^* a] = -zz^*$  是  $c$  数, 式(4.1.26)可以用式(4.1.29)写作

$$|z\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2} e^{za^\dagger} e^{-z^* a} |0\rangle \quad (4.1.30)$$

再用式(4.1.21)和式(4.1.22), 有

$$|z\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2\right) e^{za^\dagger} |0\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} z^n |n\rangle \quad (4.1.31)$$

在定义式(4.1.26)中,  $z^*$  开始是出现的, 但由于式(4.1.21),  $z^n$  最后并没有进入式(4.1.31)。因此, 标记正则相干态只用  $z$  已经足够。从式(4.1.31)直接得到

$$\langle z_2 | z_1 \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|z_2|^2 + z_2^* z_1 - \frac{1}{2}|z_1|^2\right) \quad (4.1.32)$$

它是  $z_1$  和  $z_2$  的连续函数, 对任意两个复数  $z_1$  和  $z_2$  都不为 0。下面验证单位元的分解成立。对复数  $z$  的积分测度是(用极坐标)

$$d^2 z = d(\text{Re}z) d(\text{Im}z) = |z| dz |dz| d\theta \quad (4.1.33)$$

因此

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int |z\rangle \langle z| d^2 z &= \frac{1}{\pi} \sum_{n,m} \frac{1}{\sqrt{n!} m!} \int e^{-|z|^2} z^n z^m |m\rangle \langle n| d^2 z \\ &= \sum_n \frac{1}{(n!)} \int e^{-|z|^2} |z|^{2n} |n\rangle \langle n| d|z|^2 \end{aligned}$$

<sup>①</sup> 在 W. H. Louisell 所著的 *Quantum Statistical Properties of Radiation* 中, 关于算符代数的一章中有许多有用的定理和公式。

$$= \sum_n |n\rangle \langle n| = I \quad (4.1.34)$$

在上面的推导中用到了  $z^* n z^m = |z|^{m+n} e^{i(m-n)\theta}$  和  $\int_0^{2\pi} d\theta e^{-i(m-n)\theta} = 2\pi \delta_{mn}$ , 最后的等式是因为  $|n\rangle$  (式(4.1.22)) 是正交归一完备集而成立的, 验证完毕。

经常会遇到计算对易子  $[e^{-za^\dagger}, a]$  这类问题。如果函数  $f(a^\dagger)$  可以通过  $a^\dagger$  表示 (例如展开为幂级数), 则有

$$[f(a^\dagger), a] = \frac{\partial f}{\partial a^\dagger} [a^\dagger, a] = -\frac{\partial f}{\partial a^\dagger} \quad (4.1.35)$$

$$[f(a), a^\dagger] = \frac{\partial f}{\partial a} [a, a^\dagger] = \frac{\partial f}{\partial a} \quad (4.1.36)$$

从以上关系可得

$$[e^{-za^\dagger}, a] = ze^{-za^\dagger}$$

因此有

$$e^{-za^\dagger} a e^{za^\dagger} = a + z \quad (4.1.37)$$

将式(4.1.37)等号左右双方作用于  $|0\rangle$ , 得

$$e^{-za^\dagger} a e^{za^\dagger} |0\rangle = (a + z) |0\rangle = z |0\rangle$$

使用  $|z\rangle$  的定义式(4.1.31), 有

$$e^{-za^\dagger} a e^{za^\dagger} |0\rangle = e^{-za^\dagger} a e^{|z|^2/2} |z\rangle = e^{-za^\dagger} e^{|z|^2/2} a |z\rangle$$

令上面两式等号右侧相等, 得

$$a |z\rangle = e^{za^\dagger} e^{-|z|^2/2} z |0\rangle = z |z\rangle \quad (4.1.38)$$

正则相干态是消灭算符  $a$  的本征态, 本征值是  $z$ , 这是正则相干态的一个重要性质。它的标志  $z$  就是  $a$  的本征值。从式(4.1.38)得

$$\langle z | a | z \rangle = z$$

正则相干态的标记  $z$  就是消灭算符在相干态的平均值。算符  $a$  和  $a^\dagger$  的不确定关系是

$$\langle a^\dagger a \rangle \geq \langle a^\dagger \rangle \langle a \rangle \quad (4.1.39)$$

对正则相干态, 有<sup>①</sup>

$$\langle z | a^\dagger a | z \rangle = z^* z = \langle z | a^\dagger | z \rangle \langle z | a | z \rangle \quad (4.1.40)$$

即式(4.1.39)的等式成立。因此正则相干态是最小不确定态。

正规排序算符要求所有的消灭算符要位于所有产生算符的右侧。表示方法是在算符左右加上“:”。例如,  $:aa^\dagger: \equiv a^\dagger a$ 。对正规排序算符取相干态的矩阵元, 有

$$\langle z | : F(a^\dagger a) : | z' \rangle = F(z^*, z') \langle z | z' \rangle \quad (4.1.41)$$

最后回到谐振子问题。谐振子可以用产生和消灭算符描述:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( q + i \frac{p}{m\omega} \right) \quad (4.1.42a)$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( q - i \frac{p}{m\omega} \right) \quad (4.1.42b)$$

<sup>①</sup> 式(4.1.38)的共轭是  $\langle z | a^\dagger = \langle z | z^*$ 。

此处  $q$  和  $p$  是谐振子的坐标和动量算符。哈密顿算符变为

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 = \hbar \omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \quad (4.1.43)$$

粒子数算符  $N = a^\dagger a$  的本征值为  $n$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ), 谐振子的量子数  $n$  成为粒子数表示的粒子数  $n$ 。正则相干态表示为谐振子本征态

$$|z\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} z^n |n\rangle \quad (4.1.44)$$

这个相干态随时间如何变化呢? 只要将  $e^{-(i/\hbar)\hat{H}t}$  作用于  $|z\rangle$  即可。暂时略去零点能  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ , 它

最终提供一个相因子  $e^{i(1/2)\omega t}$ , 不影响相干态的结果。演化算符  $e^{-(i/\hbar)\hat{H}t} = e^{-i\omega a^\dagger a t}$ 。当它作用于  $|z\rangle$  时有

$$\begin{aligned} e^{-i\omega a^\dagger a t} |z\rangle &= \exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} z^n e^{-i\omega n t} |n\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}|z|^2\right) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} (z e^{-i\omega t})^n |n\rangle = |e^{-i\omega t} z\rangle \end{aligned} \quad (4.1.45)$$

结果是一个新的相干态, 其标记为  $e^{-i\omega t} z$ 。谐振子的正则相干态随时间的演化归结为其标记随时间的演化。它的演化过程是稳定的, 即仍保持为相干态, 且仍是最小不确定态。薛定谔给出的谐振子波包(式(4.1.6))及其演化(式(4.1.8))正是这种相干态。将  $x$  用  $a$  和  $a^\dagger$  表示, 有

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) \quad (4.1.46)$$

因此

$$\langle z(t) | x | z(t) \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle z | e^{i\omega t a^\dagger a} (a^\dagger + a) e^{-i\omega t a^\dagger a} | z \rangle$$

利用 Baker-Campbell-Hausdorff 公式

$$\begin{aligned} \langle z(t) | x | z(t) \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [\langle z | a^\dagger | z \rangle e^{i\omega t} + \langle z | a | z \rangle e^{-i\omega t}] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [z^* e^{i\omega t} + z e^{-i\omega t}] \\ &= \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} |z| \cos(\omega t - \phi) \end{aligned}$$

这就是薛定谔的谐振子波包。

对受迫谐振子, 外力可以线性依赖于振子的坐标  $q$  与动量  $p$ , 或等价地线性依赖于  $a$  与  $a^\dagger$ , 正则相干态的特点仍能保持<sup>①</sup>。

有关自旋相干态将在第 6 章中讨论。

## 4.2 氢原子圆轨道波包与径向波包

薛定谔在 1926 年发表的文章<sup>[1]</sup>中提到, 氢原子中的电子运动轨道也可以用类似谐振子的办法处理, 即用叠加能量本征态得到的量子力学波包来模拟。但在 1929 年他致函洛伦兹

① 可参阅 Merzbacher E. Quantum Mechanics. 2nd edition. New York: John Wiley, 1970, Chapter 15, § 9.

(Lorentz)时说,在这个问题上遇到了计算上的极大困难,之后便再没提及此事。分析一下谐振子波包的构成,就不难明白构成氢原子开普勒轨道波包的困难。式(4.1.8)是严格的周期函数,它在经过一个周期  $T=2\pi/\omega$  或其整数倍后总要恢复原状。这是由于动力学相因子是

$$e^{-i(E_n/\hbar)t} = e^{-i(n+1/2)\omega t}$$

对  $n$  求和的叠加不会改变其周期性。这只在谐振子能级随  $n$  的变化是严格线性的情况下,即各能级是等距的情况下才会出现。氢原子的能级远不是等距的,对低激发态更是如此。要想模拟电子在氢原子轨道中的量子力学波包,只能利用很高激发态的能级。氢原子的能量本征值是

$$E_n = -\frac{(Ze^2)^2 m}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (4.2.1)$$

由此得

$$\frac{\partial E_n}{\partial n} = \frac{(Ze^2)^2 m}{\hbar^2} \frac{1}{n^3} \equiv \hbar\omega_{cl} \quad (4.2.2)$$

此处  $\omega_{cl}$  是电子在轨道  $n$  上的经典角频率<sup>①</sup>。在  $n$  值很大时,两个相邻能级间距的差别是  $O(n^{-3})$ ,用  $n$  值很大的波函数叠加有望获得模拟经典运动的波包。

L. S. Brown<sup>[3]</sup>在 1973 年构成了沿氢原子圆轨道运动的波包。量子力学氢原子的波函数最接近圆轨道的是  $n, l=n-1, m=\pm l$  态。 $l=n-1$  态的波函数在径向没有节点,  $(l, m=\pm l)$  的球谐函数有  $(\sin\theta)^l$  因子,使  $\psi$  在  $\theta=\pi/2$  ( $xy$  平面)有极大值。 $m=\pm l$  与  $m=-l$  由于相应的波函数为  $e^{\pm i\phi}$ ,可以和动力学相因子配合分别作为正反向运动的波包。在径向波函数方面,  $l=n-1$  的解是

$$u_{nl}(r) = \text{const} \cdot r^n e^{-\kappa_n r}, \quad \kappa_n = \frac{Ze^2 m}{\hbar^2 n} \quad (4.2.3)$$

令  $\kappa_n r \equiv x$ , 则上式的函数形式为

$$f(x) = x^n e^{-x}$$

是泊松分布。它在  $x=n$  处有极大值。实际上在  $n$  较大时,它会变为高斯分布(Gaussian distribution,又名正态分布,normal distribution)。令  $x=n+\xi$ , 此处  $\xi \ll n$ , 在  $n$  较大时有

$$x = n \left( 1 + \frac{\xi}{n} \right) \approx n \exp \left[ \frac{\xi}{n} - \frac{1}{2} \left( \frac{\xi}{n} \right)^2 \right]$$

并有

$$f(x) \approx n^n e^{-n} \exp \left[ -\frac{1}{2} n \left( \frac{\xi}{n} \right)^2 \right], \quad n \gg 1 \quad (4.2.4)$$

回到式(4.2.3)<sup>②</sup>,并用  $l=n-1$  作为指标,写出常用的  $\frac{1}{r}u_{l+1,l}$  形式:

$$\frac{1}{r}u_{l+1,l}(r) = \text{const} \cdot \exp \left[ -\frac{1}{2l} \left( l - \frac{r}{la} \right)^2 \right], \quad l \gg 1 \quad (4.2.5)$$

① 从玻尔理论有  $\frac{Ze^2}{r^2} = m r \omega_{cl}^2, r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{Ze^2 m}$ , 故有  $\omega_{cl} = \frac{(Ze^2)^2 m}{n^3 \hbar^3}$ 。

② 在式(4.2.4)中将最后的指数因子写成  $e^{-(1/2l)(\kappa r - l)^2}, \kappa = \frac{1}{na}$  ( $a$  为玻尔基态半径  $\hbar^2/Ze^2 m$ )。最后在式(4.2.5)中只保留指数上和  $r$  直接有关的部分,其他都并入常数因子。

它显示出高斯形式,  $r$  在  $r_p = l^2 a$  处有极大值, 分布的均方根值为  $\Delta r = (2l)^{-1/2} r_p$ . 角度的球谐函数是

$$Y_l^l(\theta, \phi) = \text{const} \cdot e^{i\phi} (\sin\theta)^l$$

在  $l$  较大时可取近似:

$$\sin\theta = \cos\left(\theta - \frac{1}{2}\pi\right) \approx 1 - \frac{1}{2}\left(\theta - \frac{1}{2}\pi\right)^2 \approx \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\theta - \frac{1}{2}\pi\right)^2\right]$$

总的波函数结果是

$$\psi_{l+1, l, l}(\mathbf{r}) = \text{const} \cdot e^{-(r-l^2 a)^2/2l^3 a^2} e^{i\phi} \exp\left[-\frac{1}{2}l\left(\theta - \pi/2\right)^2\right] \quad (4.2.6)$$

这是一个在  $xy$  平面上半径为  $l^2 a$  的环状定态波包。要得到在这个环上以角频率  $\omega_{\text{cl}}$  转动的球形波包, 就需取在平均值  $\bar{l}$  (很大) 附近的这类波函数叠加:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum A_l e^{-i(E_l/\hbar)t} \psi_{l+1, l, l}(\mathbf{r}) \quad (4.2.7)$$

系数  $A_l$  在  $\bar{l}$  处有很高的峰值。在  $\bar{l}$  附近求和用指标  $s$  实现:

$$l = \bar{l} + s, \quad s \ll \bar{l} \quad (4.2.8)$$

$$E_l = E_{\bar{l}} + \left.\frac{\partial E_l}{\partial l}\right|_{\bar{l}} s + \frac{1}{2} \left.\frac{\partial^2 E_l}{\partial l^2}\right|_{\bar{l}} s^2 + \dots \quad (4.2.9)$$

从  $E_n = -(Ze^2)^2 m/2 \hbar^2 n^2$  可得

$$\frac{\partial E_l}{\partial l} = \frac{(Ze^2)^2 m}{\hbar^2 (l+1)^2} = \hbar\omega_{\text{cl}} \quad (4.2.10)$$

此处

$$\omega_{\text{cl}} = \frac{(Ze^2)^2 m}{n^3 \hbar^3} \quad (4.2.11)$$

是玻尔经典轨道的角频率。此外还有

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 E_l}{\partial l^2} = -\frac{3(Ze^2)^2 m}{2 \hbar (l+1)^4} = -\frac{3}{2} \frac{\hbar\omega_{\text{cl}}}{l+1} \quad (4.2.12)$$

将式(4.2.8)~式(4.2.12)代回式(4.2.7), 得

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i(E_{\bar{l}}/\hbar)t} \psi_{\bar{l}+1, \bar{l}, \bar{l}}(\mathbf{r}) F(\phi - \omega_{\text{cl}} t, t) \quad (4.2.13)$$

此处

$$F(\phi - \omega_{\text{cl}} t, t) = \sum_s A_{\bar{l}+s} e^{i s(\phi - \omega_{\text{cl}} t)} \exp\left(i \frac{3}{2} \frac{\omega_{\text{cl}} t}{\bar{l}+1} s^2\right) \quad (4.2.14)$$

上式等号右侧第二个指数因子在  $t$  值很小时 ( $\omega_{\text{cl}} t \ll \bar{l}$ ) 接近于 1, 暂时把它当作 1, 这样就有

$$F(\phi - \omega_{\text{cl}} t, t) \approx f(\phi - \omega_{\text{cl}} t) = \sum_s A_{\bar{l}+s} e^{i s(\phi - \omega_{\text{cl}} t)} \quad (4.2.15)$$

此处  $F$  只通过  $\phi - \omega_{\text{cl}} t$  与  $t$  相关。如果选择  $A_{\bar{l}+s}$  使  $f(\phi)$  函数在  $\phi = \phi_p$  处有峰值, 则波包在时间为  $t$  时就在  $\phi = \phi_p + \omega_{\text{cl}} t$  处有峰值。这相当于在圆轨道上的匀速转动, 且是完全周期性的。但当时间足够长, 在  $\omega_{\text{cl}} t \approx \bar{l}$  时, 第二个指数因子便起作用, 使波包弥散。这个因子

来源于  $\left.\frac{\partial^2 E_l}{\partial l^2}\right|_{\bar{l}}$ , 它反映了即使  $\bar{l}$  很大时能级也有对等距的偏离。这个相位随  $l$  的变化导致

弥散。考虑高斯模型

$$A_{T+s} = \text{const} \cdot e^{-s^2[\Delta\phi(0)]^2} \quad (4.2.16)$$

式(4.2.14)给出

$$\begin{aligned} F(\phi - \omega_{cl}t, t) &= \text{const} \int_{-\infty}^{\infty} ds e^{-s^2[\Delta\phi(0)]^2} e^{is(\phi - \omega_{cl}t)} \exp\left(i \frac{3}{2} \frac{\omega_{cl}t}{l} s^2\right) \\ &= \text{const} \cdot \exp\left\{-\frac{1}{4} \frac{(\phi - \omega_{cl}t)^2}{[\Delta\phi(0)]^2 - \frac{3}{2}i\omega_{cl}/l}\right\} \end{aligned} \quad (4.2.17)$$

因此

$$|F(\phi - \omega_{cl}t, t)|^2 = \text{const} \cdot \exp\left\{-\frac{(\phi - \omega_{cl}t)^2}{2[\Delta\phi(t)]^2}\right\} \quad (4.2.18)$$

其中

$$[\Delta\phi(t)]^2 = [\Delta\phi(0)]^2 + \left(\frac{3\omega_{cl}t}{2l\Delta\phi(0)}\right)^2 \quad (4.2.19)$$

式(4.2.14)给出的分布保持了高斯形式,但它的宽度  $\Delta\phi(t)$  是随时间增加的(式(4.2.19))。

关于用原子高激发态(里德伯态, Rydberg state)波包的讨论,从 20 世纪 80 年代后期又兴旺起来。原因是短脉冲激光器的发展,使在实验上产生波包成为可能。J. Parker 和 C. R. Srouf Jr.<sup>[4]</sup> 的计算表明,皮秒(ps)激光短脉冲具有相当宽的频谱,能将原子相干地激发到相当数量的里德伯态上。脉冲过后形成的波包自由振荡,并发出辐射而衰变。这和经典轨道上的电子一样。此处波包还会扩展、弥散和恢复,显示出非经典的波动性质。波包的形成可以用半经典模型描述。令基态和激发态的相互作用绘景振幅为  $a_g(t)$  和  $a_n(t)$ , 它们满足方程

$$\dot{a}_g = -\frac{1}{2}i \sum_n \Omega_n a_n(t) f(t) e^{-i\Delta_n t} \quad (4.2.20)$$

$$\dot{a}_n = -\frac{1}{2}i \Omega_n a_g(t) f(t) e^{i\Delta_n t} \quad (4.2.21)$$

此处  $f(t)$  是激光脉冲的包络线,脉冲频率中心对  $g \rightarrow n$  跃迁的失谐为  $\Delta_n$ 。 $\Omega_n$  是跃迁的拉比频率<sup>①</sup>。将式(4.2.20)和式(4.2.21)对一些例子进行数值积分,用 6~10ps(半峰值处全宽度)脉冲,中心频率激发  $n=85$  的里德伯态。令此  $n$  值为  $\bar{n}$ 。计算表明,此脉冲可显著地激发在  $\bar{n}$  附近的 5~10 个能级。因此在形成波包时计算  $60 \leq n \leq 110$  的里德伯态是安全的。在自发衰变计算中考虑从  $g$ (基态)一直到  $n=59$  作为可能的末态。里德伯电子的波函数

$$\Psi_R(r, t) = \sum_n a_n(t) e^{-i\omega_n t} u_n(r) \quad (4.2.22)$$

$\omega_n$  是从基态到各态的跃迁频率,  $u_n(r)$  是径向波函数。只用径向波函数叠加形成的波包称为“径向波包”。它在  $r_{\min}$  到  $r_{\max}$  之间振荡。由于角动量选择定则,激光不能激发足够数量的角动量态,因此在角度上波包是非定域的。图 4.1(a)绘出了波包  $r^2 |\phi_R(r, t)|^2$  在激光脉冲后的发展。曲线上的数值代表时间(ps)。波包形成,同时向经典转向点运动并变窄。用高斯脉冲包络线进行计算,在转向点处波包的不确定性是  $\Delta p \Delta r = 0.53 \hbar$ , 接近最小不确定

① 体系  $t=0$  时位于态  $i$ , 在  $t$  时仍位于态  $i$  的概率为  $P = \cos^2 \Omega_{ij} t$ 。 $\Omega_{ij}$  即为跃迁  $i \rightarrow j$  的拉比频率。

波包。由于转向点相当于轨道的远日点, 在它附近电子速度最小, 故波包变高、变窄。图 4.1 (b) 绘出了波包返回的情况。当波包趋近核的所在地时, 会被库仑势散射。波包的往返周期正是  $\bar{n}=85$  态相应的开普顿轨道周期, 测得为 93.4 ps。波包在几个往返之后会弥散, 但经过相当长时间后又会重新恢复。如果增加激光脉冲频率使  $\bar{n}$  值增加, 同时又不改变  $\Delta n$  的数值(这需要较窄的频谱, 即更长的脉冲时间), 则波包能持续更长时间。

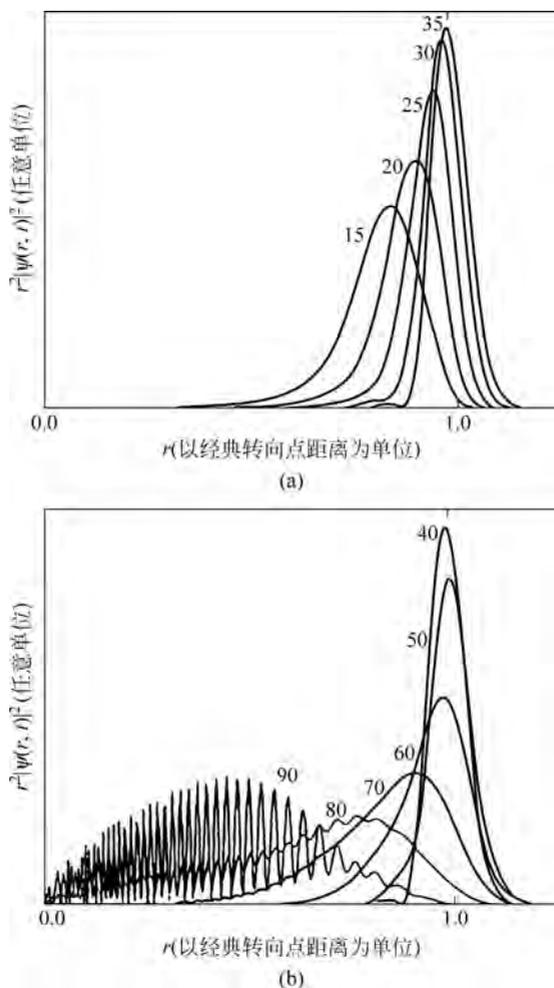


图 4.1 径向波包的运动

取自文献[4]

(a) 波包向经典转向点运动; (b) 波包返回

原子偶极的自发辐射功率为

$$\begin{aligned}
 P(t) &= \frac{4e^2}{3c^3} \langle \Psi_R | \ddot{\mathbf{r}}(t) \cdot \ddot{\mathbf{r}}(t) | \Psi_R \rangle \\
 &= \frac{4e^2}{3c^3} \left\langle \Psi_R \left| \frac{e^2 \mathbf{r}}{mr^3} \cdot \frac{e^2 \mathbf{r}}{mr^3} \right| \Psi_R \right\rangle
 \end{aligned} \tag{4.2.23}$$

波包  $\Psi_R$  加速度平方的期待值显然是在近日点附近最大, 在远日点附近最小。图 4.2 给出

了自发辐射强度, 时间间隔为 3ns, 约为 32 个周期。开始时辐射强度明显地显示出在近日点附近的峰值, 间隔正好为 93.4ps。在 2.6ns 附近再现了这种规律性, 意为波包重新恢复。在它们之间出现复杂的图样: 峰值出现的频率为基本频率的 2 倍、3 倍和 4 倍。欲求辐射功率随时间的变化, 用式(4.2.21)的积分代入式(4.2.22)和式(4.2.23), 得出结果如下:

$$P(t) \propto |\Phi(t)|^2$$

其中

$$\Phi(t) \propto \sum_n e^{i(n-\bar{n})\omega_{cl}t} \exp\left[i\frac{3}{2}\frac{\omega_{cl}}{\bar{n}}(n-\bar{n})^2t\right] \quad (4.2.24)$$

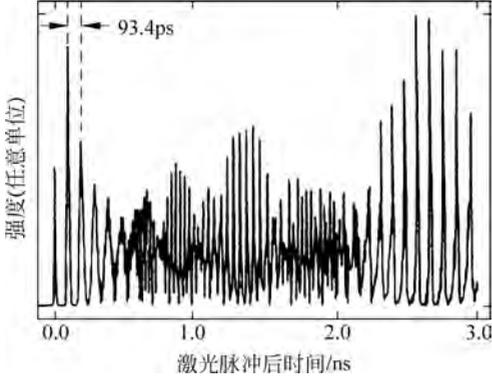


图 4.2 自发辐射强度  
取自文献[4]

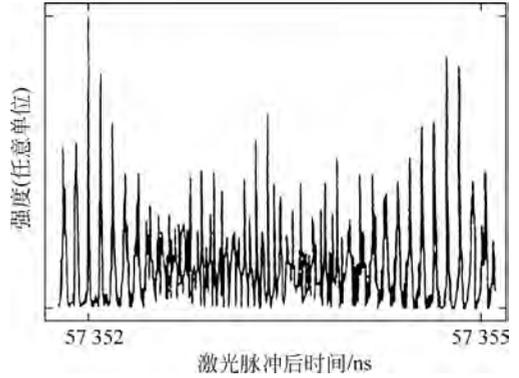


图 4.3 波包恢复  
取自文献[4]

求和只取在  $\bar{n}$  附近的少数能级(如上所述 6~10 个能级)已经足够。式(4.2.24)右侧的第一个因子是周期性的, 第二个指数因子代表能级间距偏离常数的效应。在上面的式(4.2.14)也曾出现过这个因子, 它导致波包弥散。波包弥散后经过较长时间  $t = \frac{\bar{n}}{3} \frac{2\pi}{\omega_{cl}} \equiv \frac{\bar{n}}{3} T_0$  ( $T_0$  为经典运动周期), 第二个因子变为  $e^{i\pi(n-\bar{n})^2}$ , 波包重新恢复,  $P(t)$  也恢复原值。恢复周期是

$$T_{\text{rev}} = \frac{\bar{n}}{3} T_0 \quad (4.2.25)$$

在 Parker 和 Stroud 计算的例子中,  $\bar{n} = 85$ ,  $T_{\text{rev}} = 2.636\text{ns}$ 。在两次恢复之间还有“分数恢复”, 这将在 4.4 节讨论。在图 4.3 中可看出波包的恢复。在式(4.2.24)中没有写出的还有  $E_n$  随  $(n-\bar{n})$  变化的高次项。相应的恢复时间分别与  $\bar{n}^2 T_0$ ,  $\bar{n}^3 T_0$ ,  $\dots$  成正比。例如  $t = \bar{n}^3 T_0 = 57\,352\text{ns}$  能保证在  $(n-\bar{n})^4$  之前的各项都是周期性的。图 4.3 显示了这一更高阶的恢复。

### 4.3 氢原子的 $SO(4)$ 对称性, LRL 矢量, 开普勒椭圆轨道波包

在组成椭圆轨道波包时, 起关键作用的是与椭圆轨道直接有关的守恒量, 即 LRL 矢量。它在量子力学中的推广成功构造了椭圆轨道波包。

更重要的是, 量子力学的 LRL 矢量还使对氢原子问题的理解更为深入, 即它具有  $SO(4)$  动力学对称性。在量子力学中确定一个体系的能谱, 通常要解哈密顿量的本征函数和本征

值问题,但也可以从对称性出发。如果对体系的对称性有充分的了解,就能够求得与对称性相应的守恒量完备集,则体系的性质,包括其能谱在内,就被完全解出了。称这类体系为“完全可积的”,氢原子就是这样一个体系。泡利<sup>[5]</sup>首先发现了氢原子具有比  $SO(3)$ (三维旋转对称)更高的对称性( $SO(4)$ ),之后福克<sup>[6]</sup>也得到了同样结果。量子力学的 LRL 矢量算符就是将  $SO(3)$  扩充到  $SO(4)$  所需的附加生成元<sup>①</sup>。

#### 4.3.1 经典开普勒运动的 LRL 矢量

经典开普勒运动是质量为  $m$  的质点在有心势场<sup>②</sup>

$$V(r) = -\frac{k}{r} \quad (4.3.1)$$

中的运动。对类氢原子,  $k = Ze^2$ 。运动轨道是圆锥曲线,用极坐标  $(r, \theta)$  表示,其方程是

$$\frac{1}{r} = \frac{mk}{l^2}(1 + e \cos \theta) \quad (4.3.2)$$

此处  $l$  是角动量  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$  的大小,  $e$  是轨道离心率,它和  $l$  以及能量  $E$  的关系是

$$e = \left(1 + \frac{2El^2}{mk^2}\right)^{1/2} \quad (4.3.3)$$

$E$  和  $\mathbf{L}$  都是运动常数。对  $E > 0$  的轨道,  $e > 1$ , 是双曲线; 对  $E < 0$  的轨道,  $e < 1$ , 是椭圆。椭圆轨道的特例  $e = 0$  是圆轨道,相应的能量为  $E = -\frac{mk^2}{2l^2}$ 。椭圆轨道的一个重要特性是,其半长轴  $a$  只取决于能量,证明如下。记长、短径<sup>③</sup>为  $r_2$  和  $r_1$ , 在这两点径向速度为 0, 方位角方向速度为  $l/mr$ , 因此能量守恒关系是

$$E = -\frac{k}{r} + \frac{1}{2} \frac{l^2}{mr^2} \quad (4.3.4)$$

式中,  $r$  取值为  $r_1$  或  $r_2$ 。整理为  $r$  满足的方程,得

$$r^2 + \frac{k}{E}r - \frac{l^2}{2mE} = 0 \quad (4.3.5)$$

方程的两个根之和应是

$$r_1 + r_2 = -\frac{k}{E}$$

它给出

$$a = \frac{r_1 + r_2}{2} = -\frac{k}{2E} \quad (4.3.6)$$

证明了上面的提法。椭圆离心率  $e$  与半长轴  $a$ 、半短轴  $b$  的关系是

$$e = (a^2 - b^2)^{1/2}/a \quad (4.3.7)$$

从式(4.3.3)与式(4.3.6)可得

$$e = \left(1 - \frac{l^2}{mka}\right)^{1/2} \quad (4.3.8)$$

① 用 LRL 矢量算符和角动量算符还可以构造更广泛的代数结构 Yangian, 见本书第 11 章。

② 关于经典粒子的开普勒运动可参考 H. Goldstein 的 *Classical Mechanics* (第 2 版, Addison-Wesley, 1980)。关于 LRL 矢量和它的量子力学推广, 可参考 L. Schiff 的 *Quantum Mechanics* (第 3 版, McGraw-Hill, 1968)。

③ 从焦点到轨道上最远和最近的距离。

在运动常数  $E, \mathbf{L}$  给出后, 轨道的形状及轨道平面都已确定, 平面与  $\mathbf{L}$  垂直。但轨道在平面上的方位并未确定, 实际上还有一个运动常数存在。从运动方程

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{k}{r^3}\mathbf{r} \quad (4.3.9)$$

出发, 取它与  $\mathbf{L}$  的矢量积, 得

$$\dot{\mathbf{p}} \times \mathbf{L} = -\frac{k}{r^3}\mathbf{r} \times (\mathbf{r} \times m\dot{\mathbf{r}}) = mk \left( \frac{\dot{\mathbf{r}}}{r} - \frac{\dot{r}\mathbf{r}}{r^2} \right)$$

由于  $\frac{d\mathbf{L}}{dt} = 0$ , 上式左侧可以写作  $\frac{d}{dt}(\mathbf{p} \times \mathbf{L})$ , 右侧可改写作  $mk \frac{d}{dt} \left( \frac{\mathbf{r}}{r} \right)$ 。因此有

$$\frac{d}{dt} \left( \mathbf{p} \times \mathbf{L} - mk \frac{\mathbf{r}}{r} \right) = 0 \quad (4.3.10)$$

定义

$$\mathbf{M} = \frac{1}{m}\mathbf{p} \times \mathbf{L} - k \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (4.3.11)$$

前式给出

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = 0 \quad (4.3.12)$$

即  $\mathbf{M}$  是守恒量, 被称为“LRL 矢量”。一个显然成立的关系是

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{L} = 0 \quad (4.3.13)$$

即  $\mathbf{M}$  位于轨道平面内。再计算

$$\mathbf{M} \cdot \mathbf{r} = \frac{1}{m}\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \times \mathbf{L} - kr = \frac{1}{m}l^2 - kr$$

令  $\mathbf{M}$  与  $\mathbf{r}$  的夹角为  $\theta$ , 就有

$$Mr \cos\theta = \frac{1}{m}l^2 - kr$$

或

$$\frac{1}{r} = \frac{mk}{l^2} \left( 1 + \frac{M}{k} \cos\theta \right) \quad (4.3.14)$$

与式(4.3.2)比较, 发现这正是轨道方程,  $\theta$  正是方位角。故  $\mathbf{M}$  的方向是沿长轴的, 且有

$$M = ke \quad (4.3.15)$$

从式(4.3.9)可直接算得

$$\mathbf{M}^2 = \frac{2H}{m}\mathbf{L}^2 + k^2 \quad (4.3.16)$$

此处  $H$  是哈密顿量:

$$H = \frac{1}{2m}p^2 - \frac{k}{r} \quad (4.3.17)$$

### 4.3.2 量子力学中的 LRL 矢量, 动力学对称与氢原子能级

将 LRL 矢量(式(4.3.11))推广成为量子力学的算符, 会遇到  $\mathbf{p}$  与  $\mathbf{L}$  的排序问题。泡利<sup>[5]</sup>采取对称化的排序, 引入了

$$\mathbf{M} = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p}) - k \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (4.3.18)$$

依此定义, 仍有

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{M} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{L} = 0 \quad (4.3.19)$$

从式(4.3.18)可得

$$\mathbf{M}^2 = \frac{2H}{m}(\mathbf{L}^2 + \hbar^2) + k^2 \quad (4.3.20)$$

上式和经典关系式(4.3.16)相比, 多了一项  $\hbar^2$ 。

在物理学中, 守恒量是与对称性联系在一起的。在讨论与 LRL 算符有关的守恒量以前, 先要弄清楚算符的代数关系(对易关系)。在开普勒问题中,  $L^2$  和  $L_z$  守恒是与三维空间转动  $SO(3)$  相联系的, 这属于时空对称性。在推导守恒量  $\mathbf{M}$  时会用到库仑作用(式(4.3.1))。这是哈密顿量  $H$  的性质, 这种对称性被称为“动力学对称性”。现在有 6 个算符  $L_x, L_y, L_z; M_x, M_y, M_z$ 。已知对易关系

$$[L_x, L_y] = i\hbar L_z \quad (4.3.21)$$

和另两个循环排列关系。 $\mathbf{M}$  与  $\mathbf{L}$  分量的对易关系是

$$[M_x, L_x] = 0 \quad (4.3.22)$$

$$[M_x, L_y] = i\hbar M_z \quad (4.3.23)$$

$$[M_x, L_z] = -i\hbar M_y \quad (4.3.24)$$

和另外 6 个循环排列的关系。 $\mathbf{M}$  分量间的对易关系比较复杂, 涉及  $H$ , 它们是

$$[M_x, M_y] = -\frac{2i\hbar}{m}HL_z \quad (4.3.25)$$

和另外两个循环排列的关系。因为  $H$  出现在代数关系中, 6 个算符的  $\mathbf{L}$  和  $\mathbf{M}$  并不封闭。但如果将  $H$  局限于一个与本征值  $E$  有关的希尔伯特子空间中,  $H$  就可以被  $E$  代替。进行重新标度, 定义  $\mathbf{M}'$ :

$$\mathbf{M}' = \left(-\frac{m}{2E}\right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{M} \quad (4.3.26)$$

就有

$$[M'_x, M'_y] = i\hbar L_z \quad (4.3.27)$$

和另两个循环排列关系。因式(4.3.22)、式(4.3.23)和式(4.3.24)对  $\mathbf{M}$  的分量是线性的, 它们对  $\mathbf{M}'$  也是成立的。由此可见, 局限于一个固定本征值  $E$  并进行重新标度化就得到了封闭的李代数(Lie algebra)。正因为标度化包括了因子  $E$ , 由代数关系便能决定能谱。

考虑四维空间旋转群  $SO(4)$ , 其生成元是

$$L_{ij} = r_i p_j - r_j p_i, \quad i, j = 1, 2, 3, 4 \quad (4.3.28)$$

共有 6 个独立的生成元, 因为对角元  $i=j$  为 0, 而  $L_{ij} = -L_{ji}$ 。令

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{L} &\text{ 为 } (L_{23}, L_{31}, L_{12}) \\ \mathbf{M}' &\text{ 为 } (L_{14}, L_{24}, L_{34}) \end{aligned} \right\} \quad (4.3.29)$$

即可由

$$[r_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3, 4 \quad (4.3.30)$$

实现  $\mathbf{L}, \mathbf{M}'$  分量的对易关系。 $so(4)$  代数<sup>①</sup>包含两个  $su(2)$  子代数:

<sup>①</sup> 李代数用小写, 以区别于相应的李群。

$$so(4) \supset su(2) \oplus su(2)$$

定义

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{I} &= \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{M}') \\ \mathbf{K} &= \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{M}') \end{aligned} \right\} \quad (4.3.31)$$

容易验证任意  $\mathbf{I}$  的分量与任意  $\mathbf{K}$  的分量对易, 而  $\mathbf{I}$  与  $\mathbf{K}$  分别组成两个  $su(2)$  代数, 即有

$$[I_x, I_y] = i \hbar I_z \quad (4.3.32a)$$

$$[K_x, K_y] = i \hbar K_z \quad (4.3.32b)$$

以及以上两式的循环排列关系。这两个代数是相互独立的:

$$[\mathbf{I}, \mathbf{K}] = 0 \quad (4.3.33)$$

此外还有

$$[\mathbf{I}, H] = 0, \quad [\mathbf{K}, H] = 0 \quad (4.3.34)$$

对易关系式(4.3.32)导致

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{I}^2 &= i(i+1) \hbar^2 \\ \mathbf{K}^2 &= \kappa(\kappa+1) \hbar^2 \end{aligned} \right\} i, \kappa = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots (\text{整数或半整数}) \quad (4.3.35)$$

$so(4)$  是二秩代数, 有两个卡西米尔算符(Casimir operator): 它们由生成元构成, 但和所有生成元对易, 可以选择  $\mathbf{I}^2$  和  $\mathbf{K}^2$ , 也可以选择它们的组合

$$\left. \begin{aligned} C &= \mathbf{I}^2 + \mathbf{K}^2 = \frac{1}{2}(\mathbf{L}^2 + \mathbf{M}'^2) \\ C' &= \mathbf{I}^2 - \mathbf{K}^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{M}' \end{aligned} \right\} \quad (4.3.36)$$

由于开普勒问题的特殊性,  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{M}' = 0$ , 它相应的  $so(4)$  是个特殊的例子  $\mathbf{I}^2 = \mathbf{K}^2$ , 即量子数  $i = \kappa$ 。因此

$$C = 2\kappa(\kappa+1) \hbar^2, \quad \kappa = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \quad (4.3.37)$$

从式(4.3.20)和式(4.3.26)有

$$C = \frac{1}{2} \left( \mathbf{L}^2 - \frac{m}{2E} \mathbf{M}^2 \right) = -\frac{mk^2}{4E} - \frac{1}{2} \hbar^2$$

和式(4.3.37)相比, 解出  $E$ , 得

$$E = -\frac{mk^2}{2 \hbar^2 (2\kappa+1)^2} \quad (4.3.38)$$

令  $n = 2\kappa + 1$ , 由  $\kappa$  的取值  $0, \frac{1}{2}, 1, \dots$  (式(4.3.35)) 得到  $n$  的取值  $n = 1, 2, 3, \dots$ , 再代入  $k = Ze^2$ , 就有

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2 \hbar^2 n^2} \quad (4.3.39)$$

这正是氢原子的能级。这里没有解薛定谔方程, 仅依靠动力学对称的代数性质就得出了能谱。福克<sup>[6]</sup>也提出了氢原子的  $SO(4)$  对称性, 可参考文献[7]和文献[8]。

动力学对称性在分析原子核的集体运动中起了重要作用, 这就是“相互作用玻色子模型”。

## 4.3.3 开普勒椭圆轨道波包的构成

M. Nauenberg<sup>[9]</sup>用量子 LRL 矢量构造了开普勒椭圆轨道的量子力学波包。经典开普勒轨道位于  $xy$  平面, 离心率为  $e$ 。相应的两个  $\mathbf{M}$  分量  $M_x, M_y$  和  $L_z$  组成与库仑势束缚态哈密顿量  $SO(3)$  对称的生成元<sup>①</sup>:

$$[M_x, M_y] = -2iHL_z, \quad [L_z, M_x] = iM_y, \quad [L_z, M_y] = -iM_x \quad (4.3.40)$$

此处

$$H = \frac{p^2}{2} - \frac{1}{r} \quad (4.3.41)$$

我们考虑的实际上是二维氢原子问题<sup>②</sup>, 它的能量本征值是

$$E_n = -\frac{m(Ze^2)^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots \quad (4.3.42)$$

相应的本征函数是

$$\psi(\rho, \phi) \propto e^{i\phi} \rho^{|l|} e^{-\rho/n} F(-n_\rho, 2|l|+1, 2\rho/n) \quad (4.3.43)$$

此处  $(\rho, \phi)$  是极坐标,  $F$  是合流超几何函数, 三个量子数中只有两个是独立的:

$$\left. \begin{aligned} l &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots \\ n_\rho &= 0, 1, 2, \dots \\ n &= n_\rho + |l| + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \end{aligned} \right\} \quad (4.3.44)$$

从式(4.3.40)中  $M_x$  和  $M_y$  的对易关系可以得到相应力学量的不确定关系:

$$\Delta M_x \Delta M_y \geq \frac{1}{2} | \langle -2HL_z \rangle | \quad (4.3.45)$$

以下要证明, 构成模拟经典轨道的量子波包的波函数是  $H$  的本征态并使  $\Delta M_x \Delta M_y$  涨落最小, 即等式(4.3.45)成立。这些状态满足以下本征方程:

$$(M_x + i\delta M_y)\psi = \eta\psi \quad (4.3.46)$$

此处  $\delta$  是实参数(将和离心率  $e$  联系起来),  $\eta$  是非厄密算符  $M_x + i\delta M_y$  的本征值, 因此可以是复数。由于  $M_x$  与  $M_y$  不对易,  $\psi$  并非它们的同时本征函数。 $\psi$  同时还是  $H$  的本征函数:

$$H\psi = E_n\psi \quad (4.3.47)$$

构成波包的基石便从式(4.3.46)和式(4.3.47)的解中选择, 它们和椭圆轨道的离心率  $e$  有关。式(4.3.46)给出

$$\langle M_x \rangle + i\delta \langle M_y \rangle = \eta \quad (4.3.48)$$

用算符  $M_x - i\delta M_y$  左乘式(4.3.46), 得

$$\begin{aligned} (M_x^2 + i\delta[M_x, M_y] + \delta^2 M_y^2)\Psi &= (M_x^2 + 2\delta HL_z + \delta^2 M_y^2)\psi \\ &= \eta(M_x - i\delta M_y)\psi \end{aligned}$$

此式进一步给出

$$\begin{aligned} \langle M_x^2 \rangle + 2\delta E_n \langle L_z \rangle + \delta^2 \langle M_y^2 \rangle &= \eta(\langle M_x \rangle - i\delta \langle M_y \rangle) \\ &= \langle M_x \rangle^2 + \delta^2 \langle M_y \rangle^2 \end{aligned}$$

最后一个等式根据式(4.3.48)得到。将右侧两项移往左侧, 有

① 在文献[9]中用原子单位  $Ze^2 = \hbar = m = 1$ , 本节(4.3.3节)内容依此。

② 参阅 H. Mavomatis 的 *Exercises in Quantum Mechanics* (第2版 Kluwer, 1992) 例 8.3。式(4.3.42)中  $m, Ze, \hbar$  都被恢复以便与三维情况比较。

$$(\Delta M_x)^2 + \delta^2 (\Delta M_y)^2 + 2\delta E_n \langle L_z \rangle = 0 \quad (4.3.49)$$

记  $\Delta M_x \Delta M_y = K$ , 式(4.3.49)能给出  $K$  为极小的条件:

$$(\Delta M_x)^2 = \delta K, \quad (\Delta M_y)^2 = \frac{K}{\delta} \quad (4.3.50)$$

代回式(4.3.49), 得

$$K = -E_n \langle L_z \rangle$$

因此, 最小不确定性可以在以下条件下达到:

$$\left. \begin{aligned} (\Delta M_x)^2 &= -E_n \delta \langle L_z \rangle \\ (\Delta M_y)^2 &= -\frac{E_n}{\delta} \langle L_z \rangle \end{aligned} \right\} \quad (4.3.51)$$

它说明式(4.3.46)和式(4.3.47)的共同解能达到最小不确定性, 即式(4.3.45)的等式成立。

引入升降算符  $A_{\pm}$ :

$$A_{\pm} = \pm \frac{1}{(-2H)^{1/2}} (\delta M_x + iM_y) - (1 - \delta^2)^{1/2} L_z \quad (4.3.52)$$

参数  $\delta$  的范围是  $0 \leq \delta^2 \leq 1$ 。考虑  $A_+ \psi$ :

$$A_+ \psi = \left[ \frac{1}{(-2H)^{1/2}} (\delta M_x + iM_y) - (1 - \delta^2)^{1/2} L_z \right] \psi \quad (4.3.53)$$

左乘以  $(M_x + i\delta M_y)$ , 并将此算符和  $A_+$  交换, 利用对易关系式(4.3.40), 得

$$\begin{aligned} (M_x + i\delta M_y) A_+ \psi &= A_+ (M_x + i\delta M_y) \psi + A_+ (-2H)^{1/2} (1 - \delta^2)^{1/2} \psi \\ &= \eta A_+ \psi + (-2E_n)^{1/2} (1 - \delta^2)^{1/2} A_+ \psi \\ &= \{ \eta + [-2E_n (1 - \delta^2)]^{1/2} \} A_+ \psi \end{aligned}$$

这个过程可以对  $A_+^2 \psi, A_+^3 \psi, \dots$  重复:

$$(M_x + i\delta M_y) A_+^m \psi = \{ \eta + m[-2E_n (1 - \delta^2)]^{1/2} \} A_+^m \psi \quad (4.3.54)$$

即  $A_+^m \psi$  仍是  $M_x + i\delta M_y$  的本征态, 相应的本征值为  $\eta + m[-2E_n (1 - \delta^2)]^{1/2}$ 。类似的推演证明  $A_-^m \psi$  仍是  $M_x + i\delta M_y$  的本征态, 相应的本征值为  $\eta - m[-2E_n (1 - \delta^2)]^{1/2}$ 。LRL 矢量的方向为椭圆轨道长轴, 大小是(原子单位) $e$ 。因此, 如果选择  $\eta$  为实数, 从式(4.3.48)就有

$$\langle M_x \rangle = \eta, \quad \langle M_y \rangle = 0 \quad (4.3.55)$$

从  $\eta=0$  的解开始, 用  $A_+$  在本征函数上作用  $m$  次就得到

$$e = \langle M_x \rangle = m[-2E_n (1 - \delta^2)]^{1/2}, \quad \langle M_y \rangle = 0 \quad (4.3.56)$$

的解。显然, 升降算符的作用会导致最高(最低)的  $e$  值。考虑  $H$  与  $M_x + i\delta M_y$  的共同本征态  $\psi_n^\delta$ , 它满足

$$A_+ \psi_n^\delta = \left[ \frac{1}{(-2H)^{1/2}} (\delta M_x + iM_y) - (1 - \delta^2)^{1/2} L_z \right] \psi_n^\delta = 0 \quad (4.3.57)$$

从式(4.3.57)可知,  $\psi_n^\delta$  态的有关期望值满足以下关系(先设定  $\langle M_y \rangle = 0$ ):

$$\delta \langle M_x \rangle = (-2E_n)^{1/2} (1 - \delta^2)^{1/2} \langle L_z \rangle \quad (4.3.58)$$

从定义式(4.3.54)可知,  $\psi_n^\delta$  态的  $\langle M_x \rangle$  已达最大可能值, 此时式(4.3.56)中的  $m$  已达最大值, 记为  $l_n$ , 即  $\langle M_x \rangle = l_n[-2E_n (1 - \delta^2)]^{1/2}$ 。从式(4.3.58)有  $\langle L_z \rangle = l_n \delta$ 。至此,  $\psi_n^\delta$  的性质已经完全确定: 它是  $H$  的本征态, 本征值是  $-\frac{1}{2n^2}$ ; 它是  $M_x + i\delta M_y$  的本征态, 本征值是

$\frac{l_n}{n}(1-\delta^2)^{1/2}$ 。此外还有  $\langle M_x \rangle = \frac{l_n}{n}(1-\delta^2)^{1/2}$ ,  $\langle M_y \rangle = 0$ ,  $\langle L_z \rangle = l_n \delta$ , 它也是最小不确定态。这就是构筑椭圆轨道波包的基石。量子数  $l_n$  是和最大离心率联系的, 而从索末菲椭圆轨道理论(Sommerfeld's elliptical orbis theory)可知, 最大离心率轨道的角动量量子数是

$$\left. \begin{aligned} l_n &= n - 1, & (\text{三维氢原子}) \\ l_n &= n - \frac{1}{2}, & (\text{二维氢原子}) \textcircled{1} \end{aligned} \right\} \quad (4.3.59)$$

当  $n$  值很大时,  $e = \langle M_x \rangle \rightarrow (1-\delta^2)^{1/2}$ , 与  $l_n$  无关。这一点对将来叠加不同  $n$  值(不同  $l_n$  值)的态得到模拟同一经典轨道(固定  $e$  值)的波包是十分重要的。从  $\psi_n^\delta$  的  $\langle L_z \rangle$  值可得,  $\delta = \frac{\langle L_z \rangle}{l_n}$ 。当  $n$  值很大时,  $\delta \rightarrow \frac{\langle L_z \rangle}{n} = (-2E_n)^{1/2} \langle L_z \rangle$ , 因此有

$$e = (1-\delta^2)^{1/2} = (1+2E_n \langle L_z \rangle^2)^{1/2} \quad (4.3.60)$$

和氢原子经典轨道的离心率, 即式(4.3.3)(用原子单位)

$$e = (1+2El^2)^{\frac{1}{2}}$$

相比, 正好符合。

到此为止, 还没有具体解出  $\psi_n^\delta$ 。将  $\psi_n^\delta$  用氢原子本征函数  $\psi_{n,l}(\mathbf{r})$ (式(4.3.43))展开:

$$\psi_n^\delta(\mathbf{r}) = \sum_{l=-l_n}^{l_n} C_{n,l}^\delta \psi_{n,l}(\mathbf{r}) \quad (4.3.61)$$

要求  $\psi_n^\delta$  满足

$$(M_x + i\delta M_y)\psi_n^\delta = \frac{l_n}{n}(1-\delta^2)^{1/2}\psi_n^\delta \quad (4.3.62)$$

即决定了式(4.3.61)的展开系数:

$$C_{n,l}^\delta = \frac{1}{2^{l_n}} \left( \frac{(2l_n)!}{(l_n+l)! (l_n-l)!} \right)^{1/2} (1-\delta^2)^{l_n/2} \left( \frac{1+\delta}{1-\delta} \right)^{1/2} \quad (4.3.63)$$

当  $l_n$  很大时,  $C_{n,l}^\delta$  可以用  $l$  的高斯分布近似:

$$C_{n,l}^\delta \approx \left[ \frac{\pi}{2} l_n (1-\delta^2) \right]^{-1/4} \exp \left[ -\frac{(l-\delta l_n)^2}{l_n (1-\delta^2)} \right] \quad (4.3.64)$$

$\psi_n^\delta(\mathbf{r})$  是“相干能量本征态”, 能量值为  $-\frac{1}{2n^2}$ ,  $n$  是固定值, 它是  $l$  态的叠加以给出  $\delta$  参数, 它的空间分布在相应离心率的开普勒轨道上有显著峰值。图 4.4 画出了  $\psi_n^\delta$  的空间概率分布,  $l_n=40$ ,  $\delta=0.8$  相应于  $e=0.6$ ,  $\langle L_z \rangle=32$ 。在远日点处的峰也和经典分布相符, 在此处轨道速度最小。这还不是在运动中的波包, 因为它是定态波函数。

要得到定域的波包, 取相干能量本征态对  $n$  的线性叠加:

$$\Psi^\delta(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n \psi_n^\delta(\mathbf{r}) e^{-iE_n t} \quad (4.3.65)$$

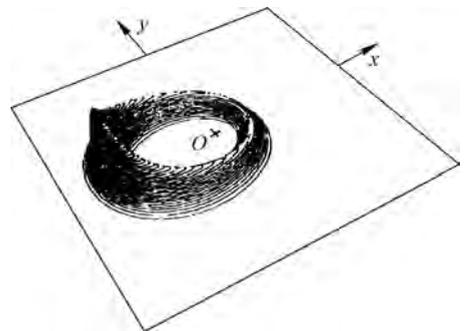


图 4.4 相干能量本征态的空间概率分布  
取自文献[9]

① 见式(4.3.44), 此处的  $l_n$  是式(4.3.44)的  $n_\rho + |l|$ 。

对系数  $a_n$ , 可以取高斯分布:

$$a_n = (2\pi\sigma^2)^{-1/4} e^{-\langle L_n - l_0 \rangle^2 / 4\sigma^2} \quad (4.3.66)$$

在图 4.5(a),(b)中画出了二维情况的波包运动(数值计算结果):  $e=0.6, \langle L_z \rangle=32, \delta=0.8, l_0=40, \sigma^2=3.0$ 。图(a)中的  $t=0$ , 图(b)中的  $t=0.5T_0$  ( $T_0$  为开普勒周期)。从图中看出, 从近日点开始, 波包的运动变慢, 形状收缩, 到远日点处变得更陡。当波包转回近日点时, 宽度比  $t=0$  时增加, 经过两个周期以后(图 4.6), 波包已经展宽得“首尾相接”了。量子力学的干涉效应使波包振幅在轨道上有了非均匀性的变化, 出现了波包弥散、分数恢复相间以至整体恢复等量子力学的固有现象。

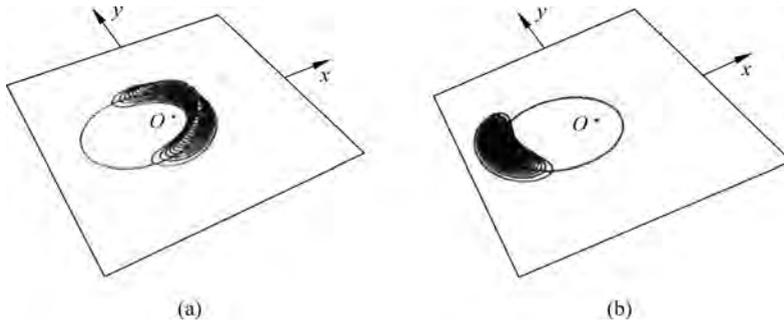


图 4.5 波包的运动

取自文献[9]

(a)  $t=0$ ; (b)  $t=0.5T_0$

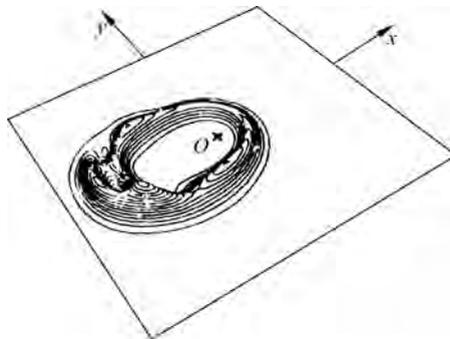


图 4.6  $t=2T_0$  波包变宽

取自文献[9]

#### 4.3.4 量子力学中的卢瑟福原子

所谓卢瑟福原子, 是指在当年的卢瑟福原子模型(Rutherford atomic model)中, 电子围绕原子核做开普勒运动, 其轨道是非量子化的。那么, 有可能构造一个不扩散的量子力学波包模拟电子在原子中的开普勒运动吗? 答案是: 在一个配角的协助下是可能的。这个配角可以是外场, 或是作为第三体的另一个电子。故事要从在太阳-木星体系的稳定拉格朗日点处围绕太阳运动的特洛伊小行星(Trojan asteroids)说起。拉格朗日点是在一个局限的三体问题(太阳、一个行星以及一个质量为  $m$  的第三个物体——称为“试验质量”)中的平衡点。行星围绕太阳(或更准确地说, 围绕太阳和行星的质量中心)以角频率  $\omega$  转动。在和行星共同

转动的坐标系中有平衡点, 在此处太阳与行星的引力正好和离心力平衡。试验质量位于此点可以在转动系中静止, 或在太阳-行星惯性系中以角频率  $\omega$  转动。如果拉格朗日点是稳定平衡点, 试验质量可以在它附近做小振动。在转动系中, 行星作用于试验质量的引力是一个常数矢量, 它在惯性系中是绕太阳-行星质心以角频率  $\omega$  转动的矢量。I. Bialynicki-Birula, M. Kalinski 和 J. H. Eberly<sup>[10-11]</sup> 提出, 这样的体系可以通过位于角频率  $\omega$  的圆极化电磁场中的氢原子来实现。在库仑场和圆极化电磁场中有电子的稳定圆轨道存在, 但它不是定态。在原子单位 ( $e = m = \hbar = 1$ ) 中<sup>①</sup>, 体系的哈密顿量是<sup>[12]</sup>:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2} - \frac{1}{r} + \epsilon x - \omega L_z \quad (4.3.67)$$

此处  $\epsilon$  是电场强度, 角频率  $\omega$  的方向沿  $z$  轴, 场的方向沿转动坐标系的  $x$  轴。这个哈密顿量的本征函数(相应本征值  $E^j(\epsilon)$ )用氢原子波函数展开如下式:

$$\psi_\epsilon(r, \theta, \phi) = \sum_{nlm} c_{nlm} R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (4.3.68)$$

定态薛定谔方程给出展开系数所满足的方程:

$$\epsilon \sum_{n'l'm'} \mathbf{x}_{nlm}^{n'l'm'} c_{n'l'm'}^j = [E^j(\epsilon) - E_n + m\omega] c_{nlm}^j \quad (4.3.69)$$

此处用  $j$  表示式(4.3.67)的能量本征值,  $E_n = -1/2n^2$  是氢原子的能量本征值,  $\mathbf{x}_{nlm}^{n'l'm'}$  是偶极矩阵元。如在 4.2 节中讨论的, 波包可以用圆里德伯态  $|n, n-1, n-1\rangle$  构造。考虑用  $k$  和  $s$  表示的多重态  $|n, n-1-k, n-1-k-s\rangle$ , 此处  $k \ll n, s \ll n$ 。偶极矩阵元的形式是已知的<sup>[13]</sup>, 而在条件  $k \ll n, s \ll n$  时, 不同多重态间矩阵元的值远小于相同多重态间的值, 相比之下可以忽略。此外, 我们将注意力集中在旋转坐标系中的本征函数, 它们在角动量空间局限于展开式(4.3.68)中以某个值  $n_0$  为中心的有限数量的一些态。在上述条件下可以取所有非零的矩阵元为  $\mathbf{x}_{nlm}^{n'l'm'} = n_0^2/2 = r_0/2$ , 此处  $r_0$  是量子数为  $n_0$  的玻尔轨道半径。  $n$  值的局限可以允许将氢原子能量本征值在  $n_0$  附近展开到二阶, 即有

$$E_n = -\frac{1}{2n_0^2} + \omega_c \delta n - \frac{3}{2} \frac{\delta n^2}{r_0^2} \quad (4.3.70)$$

此处  $\omega_c = 1/n_0^3$  是轨道  $n_0$  的开普勒频率,  $\delta n = n - n_0$ 。本征方程式(4.3.69)化简后就是在傅里叶空间的马蒂尔方程(Mathieu function)。用以  $e^{i\delta n \phi}$  为基的位形空间方程表示为

$$\left[ \frac{3}{2} \frac{1}{r_0^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \epsilon r_0 \cos \phi \right] f = [E^j(\epsilon) - E_{n_0} + (n_0 - k - s)\omega] f \quad (4.3.71)$$

这是质量为  $-1/3$  的量子摆的库仑方程。本征值  $E_{ks}^j(\epsilon)$  对强场和弱场情况都有解析表达式<sup>[12]</sup>, 量子数  $k$  和  $s$  与角动量有关,  $j$  代表量子摆的激发状态。对比不进行细节讨论, 只简单给出结果。在文献[11]中, 作者用数值计算证实了里德伯形状不变的波包的存在。图 4.7 给出了在惯性系中波包随时间演化的等值图。每个周期取三幅图, 分别是第 1, 2, 3, 5, 7, 10 周期。参数如下:

$$\omega = 209.049 \text{GHz}, \quad \epsilon = -2243.36 \text{V/m}, \quad r_0 = 3394.71 \text{(玻尔半径)}$$

该图给人以波包形状保持的强烈印象, 这是库仑能谱的非线性被压制的结果。文献[12]的

① 在原子单位体系中, 长度单位是玻尔轨道半径  $a_0 = \frac{\hbar^2}{e^2 m_e} = 5.29 \times 10^{-11} \text{m}$ , 能量单位是氢原子结合能  $\frac{m_e e^4}{2 \hbar^2} =$

13.6eV。其他单位均可由此导出。例如时间单位是光传播玻尔轨道半径长度所需的时间, 即  $1.765 \times 10^{-19} \text{s}$ 。

一个很重要的结果是: 特洛伊波包可以通过从圆轨道开始将电磁场绝热引入而得到。图 4.8 显示了电子概率密度的角度局域化。它在  $t=0$  以及在 6 个、14 个、20 个和 24 个周期时的 4 幅快照, 表明了在场指数增加时角度的局域化增强。初态是  $n=20$  的圆轨道。

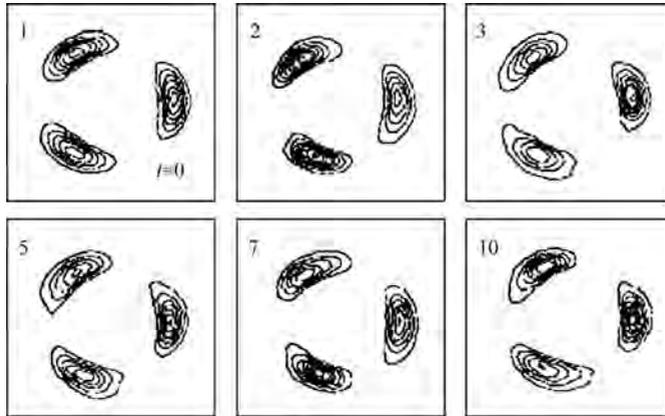


图 4.7 在惯性系中波包随时间的演化  
取自文献[11]

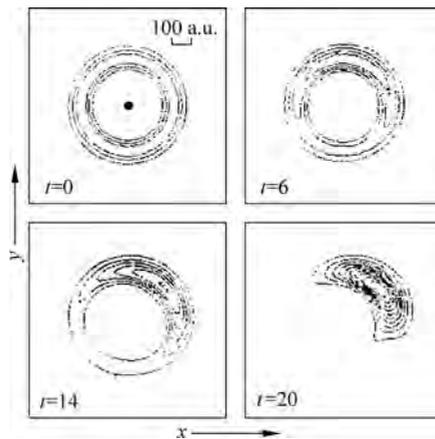


图 4.8 电子概率密度的角度局域化  
取自文献[12]

原子中电子的不扩散的波包也可以不用外场的帮助而作为特洛伊小行星的模拟而实现<sup>[14-15]</sup>。在 2-电子原子中, 两个电子非对称激发到里德伯态:  $\langle r_1 \rangle \ll \langle r_2 \rangle$ , 电子 1 和电子 2 分别代表内电子和外电子。在经典绝热模型中, 当外电子旋转一周时, 内电子已经旋转了许多周。时间尺度的差别允许我们在此时应用绝热近似。外电子可以感受到内电子对于库伦势的展蔽效应, 因而  $Z_{\text{eff}} \ll 1$ 。外电子提供了旋转电场, 可使核心(原子核和内电子)极化, 使内电子的椭圆轨道进动。两个电子的转动方向相反, 内电子椭圆轨道的长轴绝热地跟随外电子, 如图 4.9 所示。2-电子原子的含

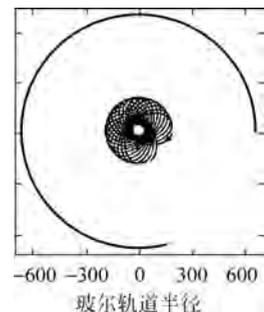


图 4.9 电子经典轨道的数值模拟  
取自文献[15]

时哈特里方程(Hartree equation)是:

$$H_i \psi_i = i \frac{\partial \psi_i}{\partial t}, \quad i = 1, 2 \quad (4.3.72)$$

此处

$$H_i = -\frac{\nabla^2}{2} - \frac{2}{|\mathbf{r}|} + \int \frac{\rho_j(\mathbf{r}, t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad i \neq j \quad (4.3.73)$$

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho_1(\mathbf{r}, t) + \rho_2(\mathbf{r}, t) = |\psi_1(\mathbf{r}, t)|^2 + |\psi_2(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (4.3.74)$$

忽略变换势(福克项)是安全的, 两个电子相距很远, 因此  $\psi_1(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r})$  对所有的点  $\mathbf{r}$  都几乎为 0。这种情况允许我们在  $H_1$  的多极展开中对外电子保留偶极项, 对内电子保留单极项。这样哈特里方程就成为两个独立电子的薛定谔方程:

$$H_1 = -\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r}_1|} + \frac{\mathbf{d}(t) \cdot \mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_1|^3} \quad (4.3.75)$$

$$H_2 = -\frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{2}{|\mathbf{r}_2|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}(t)|} \quad (4.3.76)$$

此处

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{R}(t) &= \int \psi_1^*(\mathbf{r}_1, t) \mathbf{r}_1 \psi_1(\mathbf{r}_1, t) d\mathbf{r}_1 \\ \mathbf{d}(t) &= \int \psi_2^*(\mathbf{r}_2, t) \mathbf{r}_2 \psi_2(\mathbf{r}_2, t) d\mathbf{r}_2 \end{aligned} \right\} \quad (4.3.77)$$

对于  $\mathbf{R}$  和  $\mathbf{d}$  以相同角频率  $\omega$  以及同样相位转动, 有

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{R}(t) &= R(\hat{\mathbf{x}} \cos \omega t + \hat{\mathbf{y}} \sin \omega t) \\ \mathbf{d}(t) &= d(\hat{\mathbf{x}} \cos \omega t + \hat{\mathbf{y}} \sin \omega t) \end{aligned} \right\} \quad (4.3.78)$$

将式(4.3.75)和式(4.3.76)中与时间有关的项线性化以后, 耦合定态哈特里方程变为

$$\left. \begin{aligned} \left[ -\frac{\nabla^2}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r}|} - E_1 x - \omega L_z \right] \phi_1 &= \epsilon_1 \phi_1 \\ \left[ -\frac{\nabla^2}{2} - \frac{2}{|\mathbf{r}|} + E_2 x - \omega L_z \right] \phi_2 &= \epsilon_2 \phi_2 \end{aligned} \right\} \quad (4.3.79)$$

耦合通过  $E_1$  和  $E_2$  实现, 此处  $E_1 = \frac{2d}{R^3}$ ,  $E_2 = \frac{1}{R^2}$ 。

我们看到了两个图画的等价性, 一个是借助于外场, 另一个是借助于第三个粒子。我们在此不叙述波包的构成过程, 只给出结果<sup>[15]</sup>。两个电子与时间有关的概率密度的频闪快照示于图 4.10。外电子处于特洛伊波包态,  $n_1 = 60$ , 无量纲参数  $q = 1/R^3 \omega^2 = 0.9562$ ; 内电子处于椭圆轨道, 离心率  $\epsilon = 0.25$ ,  $n_2 = 21$ 。外电子外接正方形占据空间  $10\,800 \times 10\,800$  (任意单位), 内电子轨道是经过放大的, 给出的时间数字以旋转周期为单位。

在实验方面, H. Meada 和 T. F. Gallagher<sup>[16]</sup> 得到了 Li 原子里德伯态在微波场中的不扩散波包。他们还进一步将实验提高到用微波操控波包的水平<sup>[17]</sup>。此前的讨论强调了波包形状的保持, 实际上波包的轨道是经典的, 即轨道是非量子化的。轨道的玻尔半径  $r_0$  和旋转角频率  $\omega$  都是非量子化的, 即它们能连续变化。在实验<sup>[17]</sup>中通过在  $13 \sim 19\text{GHz}$  增减微波频率就能使电子的结合能和轨道大小连续变化。

氢原子的结合能是  $E_n = Ry/n^2$ , 此处  $Ry$  是里德伯常数。能级间距是  $\Delta E = -2Ry/n^3$ 。设波包包含  $\Delta n$  个状态。经典的开普勒频率是

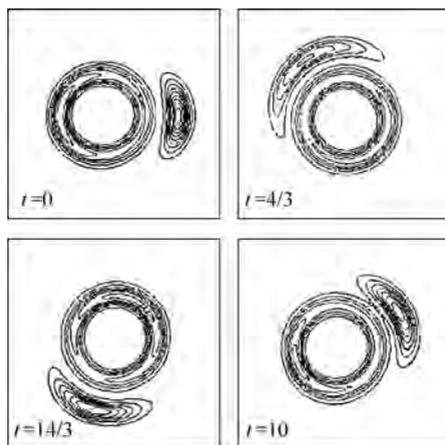


图 4.10 两个电子的概率密度随时间的演化

取自文献[15]

$$f_K = \frac{\Delta E}{h} = \frac{2Ry}{hn^3} = 6.6 \times 10^{15} \frac{1}{n^3} \text{ Hz}$$

$n=70$ ,  $f_K=19.2\text{GHz}$ , 属于微波范围。在  $x$  轴方向线性极化的微波场中, 最局域化的波包是当电子(和场的频率同步)运动在一个沿  $x$  轴具有高度离心率的轨道上实现的, 如图 4.11 所示。Li 原子的价电子被激发, 再用微波照射原子。微波频率最初调谐在开普勒频率上, 此后连续调高或调低。微波场先将电子运动锁相, 此后在连续调高或调低频率时增加或减小开普勒频率, 同时改变轨道大小和结合能。当频率增高(降低)时, 轨道增大(减小), 结合能减小(增加)。在实验中观察到  $n$  的变化, 并观察到在频率连续调整的过程中, 电子运动与微波场保持锁相。当微波频率从  $19\text{GHz}$  调到  $13\text{GHz}$  时, 最初在  $n=70$  状态的原子转变为  $n=79$  状态。

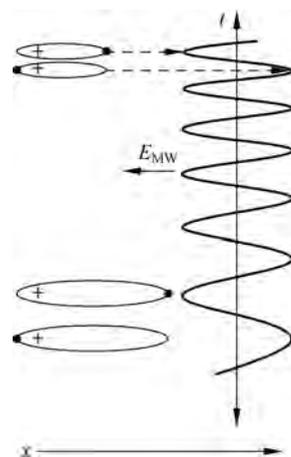


图 4.11 微波频率连续调节时电子轨道的变化

取自文献[17]

进行电子轨道的操控过程如下。用激光脉冲将 Li 原子价电子激发到  $65 < n < 90$ , 微波场最初调整到开普勒频率。微波频率的连续变化和电子轨道的变化示于图 4.11。

$n$  的变化和锁相的持续可以从分析微波脉冲照射后的终态得到。对原子施加直流电离场, 在  $1\mu\text{s}$  时间内从  $0\text{V/cm}$  增到  $40\text{V/cm}$ , 过程示于图 4.12(b)。当电离场将原子一侧的势垒降得足够低时, 电子就可以逸出。高  $n$  态的电子比低  $n$  态的电子逸出得早。场电离的电子被探测, 时间分辨的场电离信号就可以用来推断终态的分布, 如图 4.13 所示。当  $n=70$  的原子被  $19\text{GHz}$  脉冲照射时(图 4.13(a)), 它们基本停留在这个状态上。在电离场达到  $27\text{V/cm}$  时, 这个终态被电离。当微波场变得太强(约  $4\text{V/cm}$ )时, 原子被完全电离。当  $n=79$  的原子被  $19\text{GHz}$  脉冲照射时(图 4.13(b)), 原子停留在这个状态上, 这是因为微波频率和  $n=79$  态的开普勒频率相差太多, 不易将原子状态重新分配。原子在电离场达到  $18\text{V/cm}$  时被电离。当  $n=70$  的原子被频率连续调低( $19\sim 13\text{GHz}$ )的脉冲照射时(微波场为  $0.5\sim 1.4\text{V/cm}$ , 图 4.13(c)), 大多数原子从  $n=70$  被转移到  $n=79$  状态。以上结果演示了

连续变频的微波场将电子运动锁相, 并将电子轨道的开普勒频率从 19GHz 减到 13GHz, 将量子数从 70 增到 79 的过程。锁相还可以用动量选择电离进一步证实, 利用亚皮秒(sub-picosecond)半周脉冲(half cycle pulse, HCP), 如图 4.12 所示。电子轨道是沿着  $x$  轴方向高度离心的, 这个方向也是微波的极化轴。HCP 给予电子在  $+x$  方向的动量转移  $\Delta p$ 。如果电子沿  $+x$  方向运动, 它会得到足够的能量从原子逃逸。如果它沿  $-x$  方向运动, 将损失能量, 不发生电离。在微波连续变频过程中, 不同时间分几次用 HCP 对原子进行照射, 以验证电子动量与微波场同步。具体分析证实了锁相的保持。

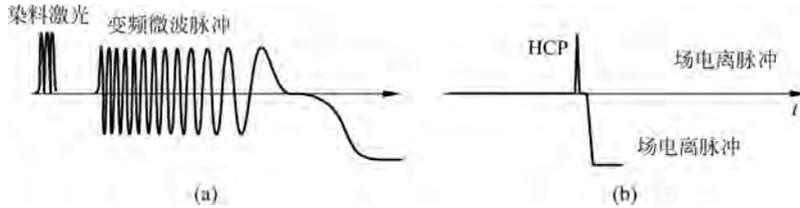


图 4.12 实验中各种脉冲的时间安排  
取自文献[17]

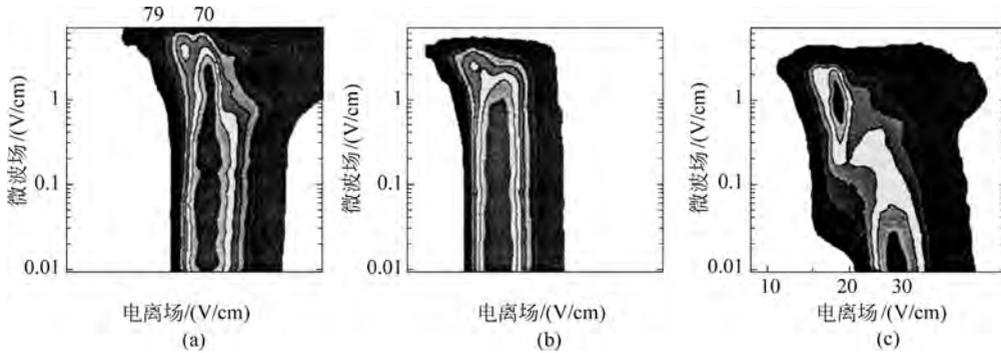


图 4.13 照射微波脉冲后的终态分布  
取自文献[17]

#### 4.4 波包恢复和分数恢复

Z. D. Gaeta 和 C. R. Stroud Jr. [18] 计算了氢原子圆轨道波包的传播、扩散、分数恢复和恢复过程, 并给出了一个清楚的图像。按 L. Brown [3] 的做法, 把  $\psi_{n,n-1,n-1}(\mathbf{r})$  对  $n$  的高斯分布叠加:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\sigma_n^2)^{1/4}} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(n-\bar{n})^2/4\sigma_n^2} \psi_{n,n-1,n-1}(\mathbf{r}) e^{it/2n^2} \quad (4.4.1)$$

此处  $\bar{n}$  和  $\sigma_n$  是高斯分布的平均值和标准偏差, 仍用原子单位。为了得到较窄和扩散较慢的波包, 采用了较大的  $\bar{n}$  值(计算采用  $\bar{n}=320, \sigma_n=2.5$ )。波包的传播、扩散、恢复和分数恢复都源于动力学相因子。这在式(4.2.14)和式(4.2.24)也遇到过。将  $t/2n^2$  在  $\bar{n}$  附近展开:

$$\frac{t}{2n^2} = \frac{t}{2\bar{n}^2} \left( 1 - 2 \frac{\Delta n}{\bar{n}} + 3 \left( \frac{\Delta n}{\bar{n}} \right)^2 - 4 \left( \frac{\Delta n}{\bar{n}} \right)^3 + \dots \right) \quad (4.4.2)$$

此处  $\Delta n = n - \bar{n}$ 。如只取括号中的线性质, 就有(只标出时间变量)

$$\Psi_{cl}(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \omega_n \psi_{n,n-1,n-1} e^{-2\pi i \Delta n t / T_0} \quad (4.4.3)$$

$\omega_n$  是高斯分布因子,  $T_0$  是相当于  $\bar{n}$  的轨道经典周期,  $T_0 = 2\pi\bar{n}^3$ 。这是完全周期的“经典”波函数。波包在  $0 \leq t \leq T_0$  的传播情况示于图 4.14。由二阶项造成的波包扩展由式(4.4.19)

给出。用式(4.2.25)  $T_{\text{rev}} = \frac{\bar{n}}{3} T_0$  ( $T_{\text{rev}}$  是恢复时间)可将式(4.2.19)改写为

$$[\Delta\phi(t)]^2 = [\Delta\phi(0)]^2 + \frac{\pi^2}{[\Delta\phi(0)]^2} \left(\frac{t}{T_{\text{rev}}}\right)^2 \quad (4.4.4)$$

当上式右侧等于  $\pi^2/3$  (随机变量在图上均匀分布时的方差)时,波包就扩展到整个圆轨道。对现在的情况,这个弥散时间记为  $T_{\text{sp}}$ ,且

$$T_{\text{sp}} = T_{\text{rev}}/8.713 = 12.2T_0$$

图 4.15 画出了波包扩展到整个圆轨道的情况,从此波包首尾相接,出现了量子力学特征的干涉现象。波包的恢复已在 4.2 节讨论过。I. Sh. Averbuch 和 N. F. Perelman<sup>[19]</sup> 给出了部分恢复的条件,在任何时间  $t = \frac{k_1}{k_2} T_{\text{rev}}$  ( $k_1$  与  $k_2$  互为质数)都可以发生分数恢复。在分数恢复时波包分裂成  $K$  个几乎相同的小波包:

$$\Psi(t) = \sum_{k=0}^{K-1} a_k \Psi_{\text{cl}}\left(t + \frac{kT_0}{K}\right) \quad (4.4.5)$$

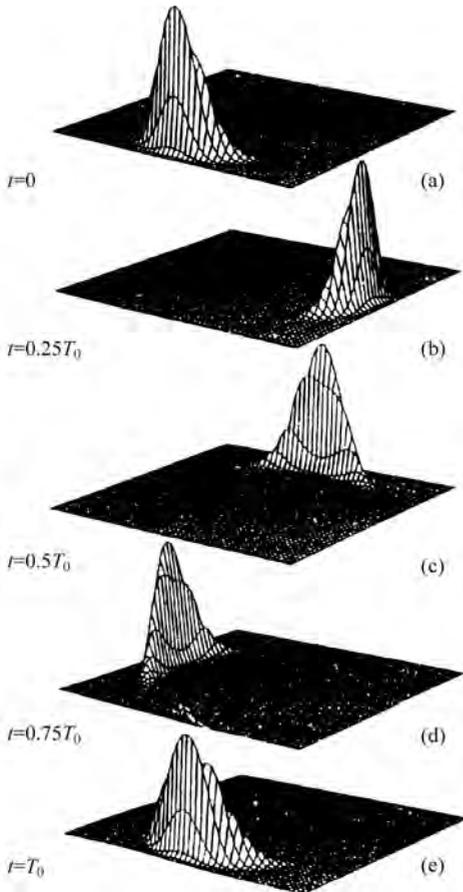


图 4.14 波包在初期演化阶段 ( $t \leq T_0$ )

取自文献[18]

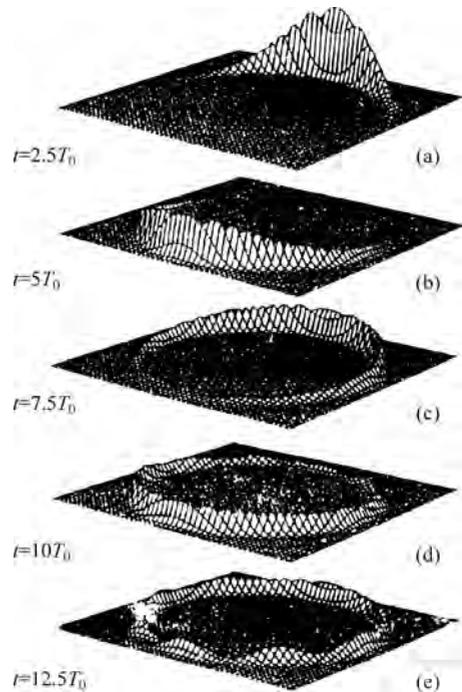


图 4.15 波包扩展到整个圆轨道

取自文献[18]

$a_k$  是相因子,  $\psi_{cl}$  定义见式(4.4.3)。图 4.16 画出了  $K=2, 3, 4, 5, 6, 7$  的分数恢复和完全恢复的情况, 注明了发生的时间。如果  $K$  值过大, 分数恢复将不明显。

在实验方面, J. A. Yeazell 和 C. R. Stroud, Jr.<sup>[20]</sup> 首先观测到在角度上定域的波包, 并观测到分数恢复。径向波包实验的发现较早。G. Alber, H. Ritsch 和 P. Zoller<sup>[21]</sup> 用时间延迟法二光子实验(第一个光子激发原子到里德伯态, 第二个光子进行探测)测到径向波包, 也发现了分数恢复现象。

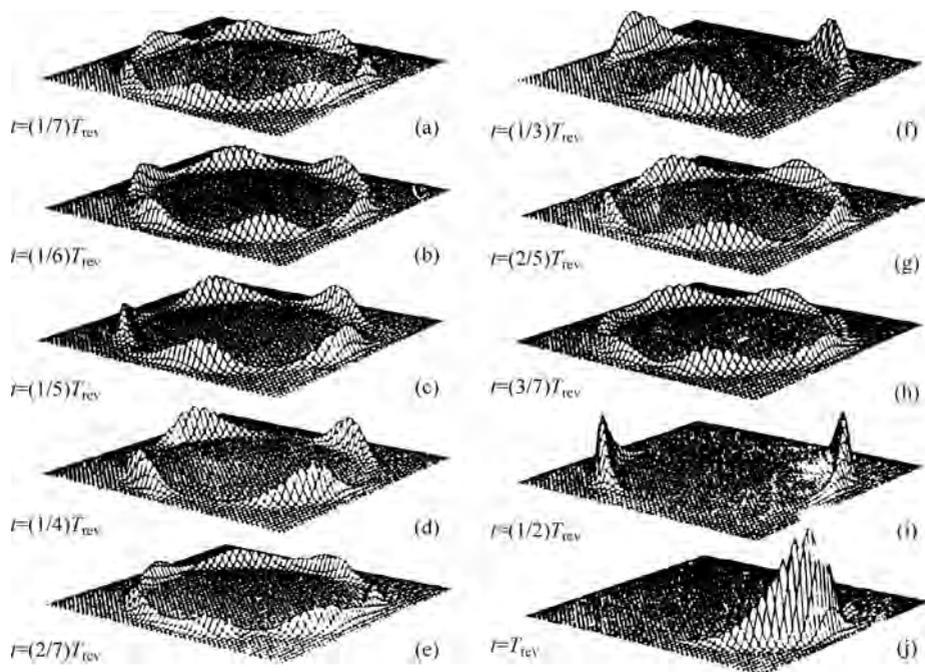


图 4.16 波包的分数恢复

取自文献[19]

由里德伯态波函数所构成的开普勒轨道波包显示出许多经典性质, 但它本质上是量子力学的。经典性质在波包弥散前( $t < T_{sp}$ )及在波包恢复时( $t = T_{rev}$  及此后的高阶恢复)是明显的。它表现为一个定域波包沿开普勒轨道传播。弥散和分数恢复是量子行为的体现。波包恢复所占据的时间之于整个波包的运动时间就像有理数嵌入实数中一样。

在薛定谔提出相干态是经典粒子运动的量子力学对应时, 对量子力学的诠释问题还没有解决。当时物理学家曾寄希望于任何量子体系都能找到与经典轨道的对应。当量子力学诠释问题解决之后, 这方面的努力就中止了。以上轨道波包的讨论有助于阐明经典性质及其局限。

## 4.5 态叠加原理与量子退相干

最突出地表明量子物理与经典物理不同的原理是态叠加原理。由于薛定谔方程是线性的, 量子体系的波函数在最一般的初始条件下会演化为哈密顿量本征态的相干叠加。以最简单的二能级体系为例, 在任意时间, 波函数可以写作

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 \quad (4.5.1)$$

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1 \quad (4.5.2)$$

对体系的状态进行测量,结果是  $\psi_1$  (概率  $|c_1|^2$ ) 或  $\psi_2$  (概率  $|c_2|^2$ )。状态  $\psi$  用密度矩阵  $\rho$  表示,是

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = |c_1|^2 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + c_1c_2^* |\psi_1\rangle\langle\psi_2| + c_2c_1^* |\psi_2\rangle\langle\psi_1| + |c_2|^2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| \quad (4.5.3)$$

测量改变了体系的状态,从状态  $\psi$  变成了混合态,它的密度矩阵是

$$\rho_m = |c_1|^2 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + |c_2|^2 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| \quad (4.5.4)$$

用矩阵形式表示,则有

$$\rho = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & c_1c_2^* \\ c_1^*c_2 & |c_2|^2 \end{pmatrix} \quad (4.5.5)$$

$$\rho_m = \begin{pmatrix} |c_1|^2 & 0 \\ 0 & |c_2|^2 \end{pmatrix} \quad (4.5.6)$$

在测量过程中非对角元消失,这称为“波函数的编缩”。纯态与混合态的区别在于叠加态间的相对相位(出现于  $\rho$  的非对角元)。在电子通过双缝的衍射过程中,双缝后面的波函数由式(4.5.1)给出,两项的相干给出了干涉条纹。如果在缝后面放置计数器尝试确定电子从哪个缝通过,则式(4.5.5)的非对角元会和干涉图样一并消失。

在经典物理理论中,体系的演化不会有相干叠加出现。由于某些原因,例如初始条件的不确定,对体系状态的预言可以有概率的论断。但那是类似式(4.5.6)混合态的预言,而不可能有两个态的相干叠加,如式(4.5.5)。问题是,如果认为量子力学是普遍的,它对于宏观体系也应成立,态的叠加也不例外。是什么原因使密度矩阵的非对角元消失呢?在量子力学初创时期,这就是“薛定谔的猫”问题。他描述了一个“魔鬼的盒子”,其中有一个放射源,它在一小时后有 50% 的概率衰变。如果它衰变,放出的辐射将会启动一个装置放出剧毒物质,关闭在盒中的猫就一定中毒而死。放射源的衰变服从量子力学规律,因此一小时后它的状态是  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ , 此处  $|\uparrow\rangle$  代表未衰变的状态,  $|\downarrow\rangle$  代表衰变了的状态。以  $|\smile\rangle$  和  $|\frown\rangle$

分别代表活猫和死猫。一小时后总体系的状态就是

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\smile\rangle|\uparrow\rangle + |\frown\rangle|\downarrow\rangle) \quad (4.5.7)$$

薛定谔巧妙地把量子体系(核)的叠加和宏观的猫的生与死缠绕在一起:猫就成为活猫和死猫的叠加。式(4.5.7)不仅表明猫的生、死概率各为 50%,这对于经典物理领域来说是可以接受的;同时还显示了活猫和死猫的相干叠加,这是经典物理理论中从未出现的。是什么机制把这个相干去掉的呢?从量子力学(可能状态的相干叠加)到经典力学(允许不同的可能状态,但它们是互相排斥的)的过渡是从量子力学初创时期就不断引起激烈争辩的问题。

玻尔给出第一个解释。他认为应在量子领域和经典领域间划出明显界线。在进行测量时用的仪器是经典的,因此应使用经典定律。玻尔自己也知道不存在一个很固定的界限,因为仪器本身也可以作为量子体系,而被另一个经典仪器所测量。这个解释在物理角度不能令人满意,因为宏观物体的组成部分都是服从量子力学规律的。在适当的条件下,它们的集

合体所满足的经典规律应该能从其基础——量子力学规律——自然得出。此外也不能把宏观和经典、微观和量子等同起来。因此问题归结为: 量子理论是普遍的, 它本身应能解释量子系统各种可能状态的叠加, 如何能在测量过程中实现这些可能状态的其中之一。近年来各种观点趋于一致: 和环境的相互作用导致退相干(decoherence), 它使纯态转变为混合态。根据量子力学观点, 一个宏观体系状态一般也是若干宏观状态的线性叠加。由于和环境的相互作用, 部分关于叠加的信息(在密度矩阵非对角元中包含的部分)会泄漏给环境。泄漏的速率应依赖于体系的大小, 或两个粒子间的距离。对于宏观体系, 这个速率应该非常大, 以致退相干可以“即刻”完成。在退相干完成后, 密度矩阵仅有对角元, 即体系处于混合态。在如何实现退相干方面, 还有不同的模型或理论。下面的讨论基于 Zurek 的研究<sup>[22-25]</sup>。和玻尔不同, 冯·诺依曼在 1932 年<sup>[26]</sup>提出, 仪器的行为也遵守量子力学规律, Zurek 采纳了这个观点。考虑体系 S, 它的希尔伯特空间由正交归一态 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ 所张成。也可以采取其他的基:

$$\left. \begin{aligned} |\oplus\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle] \\ |\otimes\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle] \end{aligned} \right\} \quad (4.5.8)$$

或

$$\left. \begin{aligned} |\rightarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle] \\ |\leftarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\rangle - i|\downarrow\rangle] \end{aligned} \right\} \quad (4.5.9)$$

如果 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ 是 $\sigma_z$ 的本征矢, 则 $|\oplus\rangle$ 和 $|\otimes\rangle$ 是 $\sigma_x$ 的本征矢,  $|\rightarrow\rangle$ 和 $|\leftarrow\rangle$ 是 $\sigma_y$ 的本征矢。探测器的希尔伯特空间由 $|\smile\rangle$ 和 $|\frown\rangle$ 张成。其可以替代的基有

$$\left. \begin{aligned} |+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\smile\rangle + |\frown\rangle] \\ |-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\smile\rangle - |\frown\rangle] \end{aligned} \right\} \quad (4.5.10)$$

或

$$\left. \begin{aligned} |\wedge\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\smile\rangle + i|\frown\rangle] \\ |\vee\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\smile\rangle - i|\frown\rangle] \end{aligned} \right\} \quad (4.5.11)$$

体系和探测器本身的哈密顿量在测量过程中不起重要作用<sup>①</sup>, 它们之间由相互作用耦合:

$$\begin{aligned} H^{\text{SD}} &= g[|\wedge\rangle\langle\wedge| - |\vee\rangle\langle\vee|] \otimes [|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|] \\ &\equiv gH \end{aligned} \quad (4.5.12)$$

SD 意为体系与探测器相互作用,  $g$  是耦合常数。直积号 $\otimes$ 后面的算符作用于体系的状态, 前面的算符作用于探测器的状态。可以算出

<sup>①</sup> 这是一个理想化的模型, 目的是探讨去相干机制, 并非要算出具体的体系及探测器的演化。模型的结果可以为更现实的情况提供引导, 4.6 节最后有关于这个问题的讨论。

$$\begin{aligned}(H^{\text{SD}})^2 &= g^2 H^2 = g^2 [|\Lambda\rangle\langle\Lambda| + |\nu\rangle\langle\nu|] \otimes [|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|] \\ &= g^2 I_D \otimes I_S \equiv g^2 I\end{aligned}\quad (4.5.13)$$

此处  $I$  是单位算符, 计算中利用了基的正交性和完全性。体系和探测器的复合体的演化算符是(用式(4.5.13))

$$\exp\left(-i \frac{H^{\text{SD}}}{\hbar} t\right) = \exp\left(-i \frac{g}{\hbar} t H\right) = \left(\cos \frac{g}{\hbar} t\right) I - i \left(\sin \frac{g}{\hbar} t\right) H \quad (4.5.14)$$

根据式(4.5.12), 有

$$H = -i [|\sim\rangle\langle\sim| + |\wedge\rangle\langle\wedge|] \otimes [|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|]$$

令复合体从  $t=0$  开始演化:

$$|\Psi(t=0)\rangle = [a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle] \otimes |\sim\rangle \quad (4.5.15)$$

有

$$\begin{aligned}|\Psi(t)\rangle &= \exp\left(-i \frac{g}{\hbar} t H\right) |\Psi(0)\rangle = \cos \frac{g}{\hbar} t [a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle] \otimes |\sim\rangle - \\ &\quad \sin \frac{g}{\hbar} t [a|\uparrow\rangle - b|\downarrow\rangle] \otimes |\wedge\rangle\end{aligned}\quad (4.5.16)$$

为了看到演化的结果, 在上式中代入  $t = \pi \hbar / 4g$ , 得

$$\left| \Psi\left(t = \frac{\pi \hbar}{4g}\right) \right\rangle = a|\uparrow\rangle \otimes |\rightarrow\rangle + b|\downarrow\rangle \otimes |\rightarrow\rangle \quad (4.5.17)$$

体系和探测器间的相互作用所带来的么正演化导致了它们状态间的关联! 但么正演化并不能解决测量问题, 因为如果代入两倍的时间, 就会有

$$\left| \Psi\left(t = \frac{\pi \hbar}{2g}\right) \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} [a|\uparrow\rangle - b|\downarrow\rangle] \otimes |\wedge\rangle \quad (4.5.18)$$

关联又不见了。如果代入三倍的时间, 有

$$\left| \Psi\left(t = \frac{3\pi \hbar}{4g}\right) \right\rangle = -[a|\uparrow\rangle \otimes |\rightarrow\rangle + b|\downarrow\rangle \otimes |\rightarrow\rangle] \quad (4.5.19)$$

关联和式(4.5.17)正好相反! 仔细想一下倒也没有什么奇怪, 因为么正演化算符式(4.5.14)本来是时间的周期函数。此外还有一个问题, 探测器知道它该测什么量吗? 从式(4.5.17)看, 它像是在测量  $|\uparrow\rangle$  或  $|\downarrow\rangle$ , 但可以把式(4.5.17)改写为

$$\left| \Psi\left(t = \frac{\pi \hbar}{4g}\right) \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle] \otimes |\sim\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} [a|\uparrow\rangle - b|\downarrow\rangle] \otimes |\wedge\rangle \quad (4.5.20)$$

对  $a=b=\frac{1}{\sqrt{2}}$ , 它是

$$\left| \Psi\left(t = \frac{\pi \hbar}{4g}\right) \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\oplus\rangle \otimes |\sim\rangle - |\otimes\rangle \otimes |\wedge\rangle] \quad (4.5.21)$$

探测器和体系的  $|\oplus\rangle$  和  $|\otimes\rangle$  发生了关联, 即探测器测的是  $|\oplus\rangle$  和  $|\otimes\rangle$ , 这说明连如何选基函数都还不确定, 这正是量子关联的特点。为了强调量子关联和经典关联的区别, 惠勒<sup>[27]</sup> 举了一个例子。将一个硬币一劈为二, 一个带有正面  $|h\rangle$ , 一个带有反面  $|t\rangle$ 。将它们各装入一个信封, 送交距离为任意远的两个观测者。这里, 选择观测的对象是肯定的: 正面或反面, 而且两个观测的结果是相互关联的。这个经典关联情况可以用混合态的密度矩阵

表示:

$$\rho = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |h_1\rangle\langle h_1| |t_2\rangle\langle t_2| + |t_1\rangle\langle t_1| |h_2\rangle\langle h_2| ] \quad (4.5.22)$$

量子关联的选择(测量什么)都是不确定的。作为量子关联的特点,在测量之前不仅两个自旋状态是未知的(这点和经典关联类似),而且连状态都是未定的(究竟是  $S_x$  的、 $S_y$  的还是  $S_z$  的本征态)。这正是量子力学的特征。这个状况是 EPR 佯谬的玻姆版本(本书 1.7 节)。冯·诺依曼了解这个问题,因此他引入了非么正的态矢量(波函数)的编缩。纯态(见式(4.5.17))的密度矩阵是

$$\begin{aligned} \rho^c = & |a|^2 | \uparrow \rangle \langle \uparrow | | - \rangle \langle - | + ab^* | \uparrow \rangle \langle \downarrow | | - \rangle \langle + | + \\ & a^* b | \downarrow \rangle \langle \uparrow | | + \rangle \langle - | + |b|^2 | \downarrow \rangle \langle \downarrow | | + \rangle \langle + | \end{aligned} \quad (4.5.23)$$

态矢编缩的结果是非对角元的消失,从而得到混合态的约化密度矩阵  $\rho^r$ :

$$\rho^c \rightarrow \rho^r = |a|^2 | \uparrow \rangle \langle \uparrow | | - \rangle \langle - | + |b|^2 | \downarrow \rangle \langle \downarrow | | + \rangle \langle + | \quad (4.5.24)$$

这样对角元的系数  $|a|^2$  和  $|b|^2$  可以给以经典解释:它们是出现  $| \uparrow \rangle$  与  $| \downarrow \rangle$  的概率。放弃存储在非对角元中的信息,换来的是测量的选择已经确定:是  $| \uparrow \rangle$  或  $| \downarrow \rangle$  而非  $| \oplus \rangle$  或  $| \otimes \rangle$ 。如果将对应式(4.5.22)的密度矩阵的非对角元去掉,测量选择的便是  $| \oplus \rangle$  和  $| \otimes \rangle$ 。

冯·诺依曼的“非么正过程”是外加的,并非量子理论本身的结果。量子退相干的原因应是宏观体系与环境的相互作用。

## 4.6 与环境相互作用导致的退相干

宏观量子系统永不能与其环境隔绝。考虑环境 E,它也是量子体系,与体系 S 及探测器 D 相互作用。它可以是仪器的一部分,具有许多自由度。它的作用是吸收密度矩阵非对角元所包含的信息从而导致波函数编缩,继而确定被测量的可观测量(称为“指针可观测量(pointer observable)”)及其本征态(称“指针基(pointer basis)”)。以下先做一般讨论,然后讨论具体模型。SDE 复合体演化如下:

$$| \Phi(t=0) \rangle = | \psi \rangle \otimes | D_0 \rangle \otimes | E(t=0) \rangle \quad (4.6.1)$$

这是  $t=0$  时的复合体状态。直积号隔开的依次是体系、探测器和环境的状态。由于体系和探测器相互作用,它们的复合体演化到  $t_1$ ,产生了一定的关联。在此之前,环境的相互作用尚未启动:

$$| \Phi(t=t_1) \rangle = \left\{ \sum_n c_n | n \rangle \otimes | D_n \rangle \right\} \otimes | E(t_1) \rangle \quad (4.6.2)$$

根据 4.5 节的讨论,此时的指针观测量尚未确定。在上式中花括号内的体系-探测器状态也可以用其他的基展开。环境与探测器的相互作用从  $t_1$  开始投入,到  $t=t_2$  的复合体状态演化为

$$| \Phi(t=t_2) \rangle = \sum_n c_n | n \rangle \otimes | D_n \rangle \otimes | E_n(t_2) \rangle \quad (4.6.3)$$

环境与体系、探测器建立了关联,也就确定了指针基  $| n \rangle$ 。这是由 ED 相互作用选定的。环境与探测关联的建立是以部分体系-探测器关联的损失为代价的。因此,此时的体系-探测器复合体已经不能随意建立除  $| n \rangle$  与  $| D_n \rangle$  以外的其他关联。这是环境的重要作用之一。以下环境的作用是把体系-探测器状态从纯态转化为混合态,即使非对角元衰减。但在这样做以前,先要确定把什么基放在对角元上。对环境不做测量,因此在求  $t > t_2$  时的约化密度矩

阵时,要对环境求迹:

$$\begin{aligned}\rho &= \text{tr}_E |\Phi(t > t_2)\rangle\langle\Phi(t > t_2)| \\ &= \sum_{m,n} c_n c_m^* |D_n\rangle\langle D_m| \otimes |n\rangle\langle m| \otimes \text{tr}_E |E_n(t)\rangle\langle E_m(t)|\end{aligned}\quad (4.6.4)$$

下面将采用简单的可解模型演示在  $t$  足够大时,  $\text{tr}_E |E_n(t)\rangle\langle E_m(t)| = \langle E_m(t)|E_n(t)\rangle$  以指数趋近  $\delta_{nm}$ , 即  $\rho$  的非对角元指数衰减: 指针可观测量的各本征态间的相干随时间衰减, 使系统进入指针可观测量的任何一个本征态而不是它们的叠加, 从而完成退相干:

$$\rho \approx \sum_n |c_n|^2 |D_n\rangle\langle D_n| \otimes |n\rangle\langle n|\quad (4.6.5)$$

SD 复合体处于混合态。它可以是  $|n\rangle \otimes |D_n\rangle$  的任何态, 几乎等于  $|c_n|^2$ , 但不同  $n$  的态是独立的, 故态叠加消失了。退相干就是这样出现的。

环境含有大量 ( $N$ ) 二能级体系。其中第  $k$  个占据  $|\smile\rangle_k$  态或  $|\frown\rangle_k$  态, 此处圆弧和下标用于标明环境状态。环境与原子间没有相互作用, 也没有自己的哈密顿量。环境与探测器相互作用的哈密顿量为

$$H^{\text{DE}} = \sum_n H_k^{\text{DE}}\quad (4.6.6)$$

此处

$$H_k^{\text{DE}} = g_k [|\smile\rangle\langle\smile| - |\frown\rangle\langle\frown|] \otimes [|\smile\rangle\langle\smile| - |\frown\rangle\langle\frown|]_k \otimes \prod_{j \neq k} 1_j\quad (4.6.7)$$

从式(4.6.7)可以看到,  $H_k^{\text{DE}}$  的本征态是探测器的任何状态  $|\smile\rangle$  或  $|\frown\rangle$  与任意一个环境原子  $k$  的任何状态  $|\smile\rangle_k$  或  $|\frown\rangle_k$  的直积, 本征值是  $\pm g_k$ 。令  $t=0$  代表 DE 相互作用开始起作用的时间, 而此时 S 与 D 已经有了关联:

$$|\Phi(0)\rangle = [a|\uparrow\rangle \otimes |\smile\rangle + b|\downarrow\rangle \otimes |\frown\rangle] \prod_{k=1}^N \otimes [\alpha_k |\smile\rangle_k + \beta_k |\frown\rangle_k]\quad (4.6.8)$$

由于探测器状态和环境原子状态的直积是  $H^{\text{DE}}$  的本征态, 在  $H^{\text{DE}}$  作用下,  $|\Phi(0)\rangle$  演化到时间  $t$  的公式变为

$$\begin{aligned}|\Phi(t)\rangle &= a|\uparrow\rangle \otimes |\smile\rangle \prod_{k=1}^N \otimes [\alpha_k e^{-ig_k t/\hbar} |\smile\rangle_k + \beta_k e^{ig_k t/\hbar} |\frown\rangle_k] + \\ & b|\downarrow\rangle \otimes |\frown\rangle \prod_{k=1}^N \otimes [\alpha_k e^{ig_k t/\hbar} |\smile\rangle_k + \beta_k e^{-ig_k t/\hbar} |\frown\rangle_k]\end{aligned}\quad (4.6.9)$$

将环境态缩写为

$$\begin{aligned}|E_{|\smile\rangle}(t)\rangle &\equiv \prod_{k=1}^N \otimes [\alpha_k e^{-ig_k t/\hbar} |\smile\rangle_k + \beta_k e^{ig_k t/\hbar} |\frown\rangle_k], \\ |E_{|\frown\rangle}(t)\rangle &\equiv \prod_{k=1}^N \otimes [\alpha_k e^{ig_k t/\hbar} |\smile\rangle_k + \beta_k e^{-ig_k t/\hbar} |\frown\rangle_k]\end{aligned}\quad (4.6.10)$$

此处  $E$  的下标  $|\smile\rangle$  和  $|\frown\rangle$  为它们和探测器状态的关联(因此用尖括号表示)。式(4.6.9)变为

$$|\Phi(t)\rangle = a|\uparrow\rangle \otimes |\smile\rangle \otimes |E_{|\smile\rangle}(t)\rangle + b|\downarrow\rangle \otimes |\frown\rangle \otimes |E_{|\frown\rangle}(t)\rangle\quad (4.6.11)$$

从  $\Phi(0)$  演化到  $\Phi(t)$  确立了指针可观测量算符

$$\hat{A} = \lambda_1 |\smile\rangle\langle\smile| + \lambda_2 |\frown\rangle\langle\frown| \quad (4.6.12)$$

$\lambda_1$  和  $\lambda_2$  为实数。实际上  $|\smile\rangle$  和  $|\frown\rangle$  就是进入  $H^{\text{DE}}$  的探测器状态, 即进入  $H^{\text{DE}}$  的状态将成为指针基。虽然在  $t=0$  时, 体系-探测器复合体也可以用其他基表示, 环境却在各种可能的基中选中了  $|\smile\rangle$  和  $|\frown\rangle$ 。体系-探测器复合体的约化密度矩阵是

$$\begin{aligned} \rho^{\text{SD}} &= \text{tr}_E |\Phi(t)\rangle\langle\Phi(t)| \\ &= |a|^2 |\uparrow\rangle\langle\uparrow| \otimes |\smile\rangle\langle\smile| + z(t) ab^* |\uparrow\rangle\langle\downarrow| \otimes |\smile\rangle\langle\frown| + \\ &\quad z^*(t) a^* b |\downarrow\rangle\langle\uparrow| \otimes |\frown\rangle\langle\smile| + |b|^2 |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \otimes |\frown\rangle\langle\frown| \end{aligned} \quad (4.6.13)$$

此处

$$z(t) = \langle E_{|\smile\rangle}(t) | E_{|\smile\rangle}(t) \rangle = \prod_{k=1}^N [\cos(2g_k t/\hbar) - i(|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2) \sin(2g_k t/\hbar)] \quad (4.6.14)$$

关联振幅  $z(t)$  在退相干过程中起决定性作用, 它的性质如下:

$$z(0) = 1 \quad (4.6.15)$$

$$|z(t)|^2 \leq 1 \quad (4.6.16)$$

$$\langle z(t) \rangle = \lim_{T \rightarrow \infty} T^{-1} \int_0^T z(t) dt = 0 \quad (4.6.17)$$

$$\langle |z(t)|^2 \rangle = 2^{-N} \prod [1 + (|\alpha_k|^2 - |\beta_k|^2)^2] \quad (4.6.18)$$

式(4.6.18)表明, 除非环境的初始状态与哈密顿量的一个本征态组合(对所有的  $k$ , 有  $\alpha_k, \beta_k$ , 其中之一为 0, 而另一个模为 1), 否则  $|z(t)|^2$  的期望值远小于 1。图 4.17 给出了关联振幅  $z(t)$  作为  $t$  的函数, 由式(4.6.14)给出,  $|\alpha_k| = |\beta_k|$ , 即  $z(t) = \prod \cos 2g_k t/\hbar$ 。图 4.17(a) 取  $N=5$ , 图 4.17(b) 取  $N=10$ , 图 4.17(c) 取  $N=15$ 。 $g_k$  的值从  $(0, 1)$  随机选出。从结果可以看到, 当  $N=15$  时这个数不大, 但对退相干的效果已经很显著, 且增加  $N$  的效果是明显的。在热力学极限  $N \rightarrow \infty$  时,  $H^{\text{DE}}$  变为不可逆的。它通过建立环境-探测器关联确立了指针基并编缩态矢。在以上的模型中, 体系、探测器、环境都遵守量子力学规律, 复合体及各部分的演化都是由有关的哈密顿量决定的。指针基的出现是动力学演化(关联建立)的结果, 没有外加的非幺正过程。指针态间的相干之所以衰减, 是与多自由度的环境相互作用的结果。关联振幅也会像统计力学中的物理量一样, 有涨落与庞加莱复现(Poincaré recurrence theorem)。将模型讨论的机制用于一般量子体系及其关联的衰减、涨落、复现, 在文献[22]和文献[23]中有进一步的讨论。

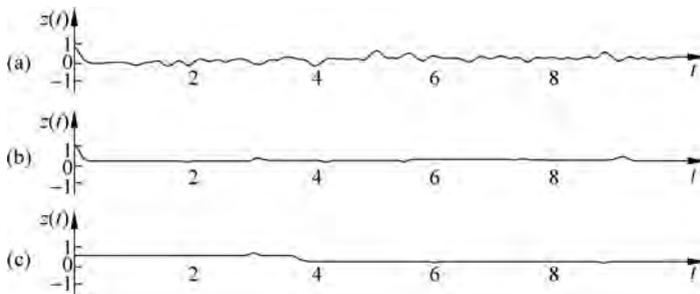


图 4.17 关联振幅随时间的演化

取自文献[22]和文献[23]

(a)  $N=5$ ; (b)  $N=10$ ; (c)  $N=15$

在写出相互作用哈密顿量(式(4.5.12))时,曾提及忽略自哈密顿量的问题。它带来的方便是:指针态都是定态,因此复合体的演化就可以直接写出(例如式(4.6.9))。这个假设对一些体系会失效,但宏观体系的开放性(与环境不能隔离)以及环境在宏观水平时使叠加原理失效的作用仍可作为其指导原则。当每一个指针态都不是定态时,就需要找出它的推广:对丧失纯态而变成混合态最有“抵抗力”的状态。W. Zurek, S. Habib 和 J. P. Paz<sup>[28]</sup>研究了做量子布朗运动(Brownian motion)的谐振子,定义了线性熵,然后求熵增加最小的条件,结论是这种状态就是相干态。

## 4.7 一个退相干的动力学模型

自从 20 世纪 80 年代以来,开放体系的量子理论研究显著加强了。很多在实验上可以研究的体系都属于这个范畴。此类体系许多属于宏观量子体系,对于它们,环境问题是至关重要的。对环境问题的处理(或模拟)也能直接采用退相干。一个易于处理的环境模型是一组大量的谐振子,也可以采用与此等价的无质量量子场。前者是 A. Caldeira 等人<sup>[29]</sup>的做法,是基于费曼等人<sup>[30]</sup>关于量子体系和耗散体系相互作用的理论。我们将在 7.5 节详细讨论这个模型。后者是 W. Zurek 和 W. Unruh<sup>[31]</sup>所用的模型。在这里,我们简单介绍模型的基本概念而不深入技术细节。记质量为 1 的谐振子坐标为  $x$  (体系),它和在  $q$  方向传播的无质量标量场  $\varphi(q, t)$  (环境)通过哈密顿量  $H_{\text{int}}$  相互作用:

$$H_{\text{int}} = \epsilon x \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad (4.7.1)$$

此处  $\epsilon$  是耦合常数。令  $\mathcal{L}$  为拉格朗日密度。从体系的作用量  $\int \mathcal{L} dt dq$  出发,可以导出谐振子与场的运动方程。谐振子的运动方程是

$$\ddot{x} + \frac{\epsilon^2}{2} \dot{x} + \Omega_0^2 x = -\epsilon \dot{\varphi}_0 \quad (4.7.2)$$

此处  $\Omega_0$  是谐振子的角频率,  $\varphi_0$  是自由传播场的解。方程式(4.7.2)可以看作朗之万方程(Legevin equation)。体系-环境相互作用的效应是双重的。它导致了阻尼力  $-\eta \dot{x}$ ,  $\eta = \epsilon^2/2$  表示黏滞性,也导致了随机的涨落力  $-\epsilon \dot{\varphi}_0$ 。在通常的朗之万方程中,涨落力是  $\langle \dot{\varphi}_0(t) \dot{\varphi}_0(0) \rangle \sim \delta(t)$ 。在高温近似下仅考虑标量场的热激发,略去与温度无关的力,取

$$\langle \dot{\varphi}_0(t) \dot{\varphi}_0(0) \rangle \approx \frac{k_B T}{2} \delta(t) \quad (4.7.3)$$

粒子的密度矩阵  $\rho(x, x')$  在位置表象中按主方程(master equation)演化:

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar} [H, \rho] - \gamma(x - x') \left( \frac{d\rho}{dx} - \frac{d\rho}{dx'} \right) - \frac{2m\gamma k T}{\hbar^2} (x - x')^2 \rho \quad (4.7.4)$$

此处  $H$  是粒子的哈密顿量,  $\gamma$  是弛豫率,  $T$  是场  $\varphi$  的温度。  $\gamma$  和黏滞系数  $\eta$  有关,而  $\eta$  取决于粒子和场在  $H_{\text{int}}$  中的耦合常数  $\epsilon$ , 即有

$$\gamma = \frac{\eta}{2m}, \quad \eta = \frac{\epsilon^2}{2} \quad (4.7.5)$$

式(4.7.4)中的第一项是动力学演化,是薛定谔方程的推论。第二项是环境的耗散效应,第三项是导致布朗运动的涨落,是导致退相干的根源。Zurek 用一个例子对退相干时间尺度做了一个估计。考虑两个高斯波包的相干叠加:

$$\chi(x) = \chi^+(x) + \chi^-(x) \quad (4.7.6)$$

波包宽度为  $\delta$ , 它们的中心相距  $\Delta x$ ,  $\Delta x \gg \delta$ , 见图 4.18。密度矩阵

$$\rho(x, x') = \chi(x)\chi^*(x') \quad (4.7.7)$$

在  $(x, x')$  平面上有 4 个峰(图 4.19), 两个来自对角元(峰的位置  $x = x'$ ), 两个来自非对角元( $x = -x'$ )。主方程式(4.7.4)的最后一项和  $(x - x')^2$  成正比。它对对角元影响不大, 但却是导致非对角元衰减的因子。衰减率可以直接从方程读出:

$$\tau_D^{-1} \approx 2\gamma \frac{mkT(\Delta x)^2}{\hbar^2}$$

退相干时间  $\tau_D$  是

$$\tau_D \approx \tau_R \frac{\hbar^2}{2mkT(\Delta x)^2} = \tau_R \left(\frac{\lambda_T}{\Delta x}\right)^2 \quad (4.7.8)$$

注意到  $\lambda_T = \frac{\hbar}{\sqrt{2mkT}}$  是热德布罗意波长,  $\tau_R = \frac{1}{\gamma}$  是弛豫时间,  $\tau_D$  可以写作

$$\tau_D = \tau_R \left(\frac{\lambda_T}{\Delta x}\right)^2 \quad (4.7.9)$$

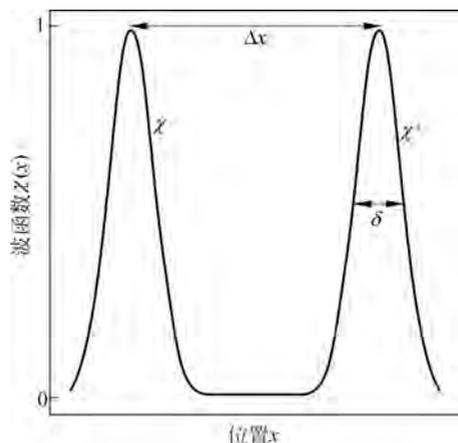


图 4.18 两个高斯波包的相干叠加  
取自文献[25]

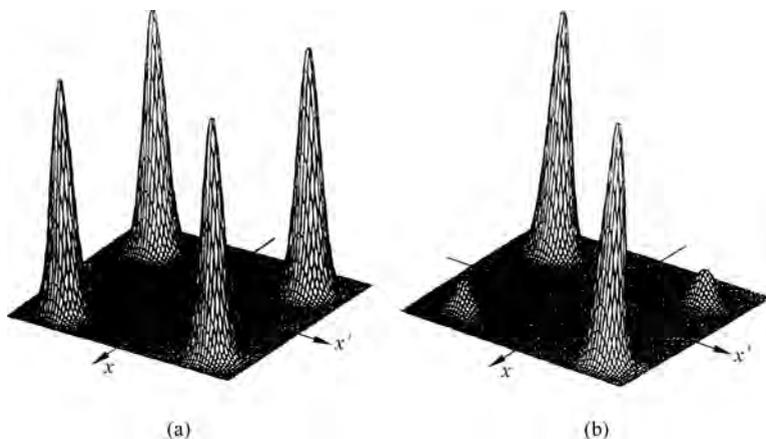


图 4.19 波包  $\chi$  的密度矩阵  
取自文献[25]  
(a) 当  $t=0$  时; (b) 部分退相干

对宏观物体,  $\tau_D \ll \tau_R$ 。例如  $T = 300\text{K}$ ,  $m = 1\text{g}$ ,  $\Delta x = 1\text{cm}$ ,  $\tau_D/\tau_R = 10^{-40}$ 。宏观上可区别的位置间的退相干是在近于瞬间发生的。在图 4.19(b)中, 非对角峰也接近消失, 两个对角元的峰就可以当作经典的位置分布函数了。另一个极端情况是引力波探测器(低温韦伯棒(Weber bar))  $m = 100\text{kg}$ ,  $T = 10^{-3}\text{K}$ ,  $\Delta x = 10^{-19}\text{cm}$ , 它的  $\tau_D/\tau_R$  可以达到  $10^{-2}$ 。退相干被低温和所需的高精度位置测量大大延缓了。如此庞大的棒必须作为量子谐振子处理<sup>①</sup>。

## 4.8 量子动力学的经典极限

量子力学是在希尔伯特空间表述的, 而经典力学是在相空间表述的。量子动力学和它的经典极限间的关系可以通过波函数的维格纳变换<sup>[32]</sup>表示:

$$W(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipy/\hbar} \psi^* \left(x + \frac{y}{2}\right) \psi \left(x - \frac{y}{2}\right) dy \quad (4.8.1)$$

维格纳分布(Wigner distribution function)  $W(x, p)$  是实函数, 但可能是负值, 因此一般情况下不能作为分布函数诠释。但如果将  $W(x, p)$  对  $p$  积分, 则有

$$\int_{-\infty}^{\infty} W(x, p) dp = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(y) \psi^* \left(x + \frac{y}{2}\right) \psi \left(x - \frac{y}{2}\right) dy = \psi^*(x) \psi(x) \quad (4.8.2)$$

该式正是  $x$  的分布函数。求  $\psi$  的傅里叶变换:

$$\phi(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip\xi/\hbar} \Psi(\xi) d\xi \quad (4.8.3)$$

其对  $p$  的分布函数是

$$\phi^*(p) \phi(p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip(\eta-\xi)/\hbar} \psi^*(\eta) \psi(\xi) d\xi d\eta \quad (4.8.4)$$

令

$$\eta = x + \frac{y}{2}, \quad \xi = x - \frac{y}{2} \quad (4.8.5)$$

有

$$\begin{aligned} \phi^*(p) \phi(p) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipy/\hbar} \psi^* \left(x + \frac{y}{2}\right) \psi \left(x - \frac{y}{2}\right) dx dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} W(x, p) dx \end{aligned} \quad (4.8.6)$$

即  $W(x, p)$  对  $x$  积分给出  $p$  的分布函数。

对于最小不确定波包

$$\psi(x) \approx \exp \left[ -\frac{(x-x_0)^2}{\delta^2} + i \frac{p_0 x}{\hbar} \right] \quad (4.8.7)$$

其维格纳分布函数是

$$W(x, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp \left[ -\frac{(x-x_0)^2}{\delta^2} - \frac{(p-p_0)^2 \delta^2}{\hbar^2} \right] \quad (4.8.8)$$

这里  $x$  与  $p$  都是高斯分布, 满足最小不确定关系, 说明  $\psi$  (式(4.8.7)) 是量子力学波函数(希尔伯特空间矢量)能给出的经典运动粒子(相空间中一点)的最逼近的模拟。

维格纳分布可以推广到密度矩阵

<sup>①</sup> 参阅 1.10 节。

$$W(x, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipy/\hbar} \rho\left(x - \frac{y}{2}, x + \frac{y}{2}\right) dy \quad (4.8.9)$$

对于式(4.7.6)给出的两个高斯波包的相干叠加  $\chi = \chi^+ + \chi^-$ , 它的维格纳分布是

$$W \approx \frac{W^+ + W^-}{2} + \frac{1}{\pi\hbar} \exp\left[-\frac{p^2\delta^2}{\hbar^2} - \frac{x^2}{\delta^2}\right] \cos\left(\frac{\Delta x}{\hbar} p\right) \quad (4.8.10)$$

此外,  $W^+$  和  $W^-$  是  $\chi^+$  和  $\chi^-$  的维格纳分布。图 4.20(a) 画出了式(4.8.10)给出的维格纳分布。除两个对  $x$  和  $p$  变量都是高斯型的分布外, 还有由第二项带来的振荡式分布。由于  $W$  的振荡行为, 它不能被诠释为相空间的分布。 $W$  的运动方程可以从主方程式(4.7.4)给出:

$$\frac{dW}{dt} = \left(-\frac{p}{m} \frac{\partial W}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial p}\right) + 2\gamma \frac{\partial(pW)}{\partial p} + D \frac{\partial^2 W}{\partial p^2} \quad (4.8.11)$$

此处  $V$  是势能,

$$D = 2m\gamma kT = \eta kT \quad (4.8.12)$$

式(4.8.11)括号中的第一项就是经典的泊松括号(Poisson bracket):

$$[H, W]_{\text{Poisson}} = \frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial W}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial W}{\partial x} \quad (4.8.13)$$

这是因为有

$$\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial V}{\partial x} \quad \text{和} \quad \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x} = \frac{p}{m}$$

对于谐振子, 经典动力学在相空间中的刘维尔(Liouville)形式从量子动力学得出。对于一般体系, 式(4.8.11)右侧还应有量级为  $O(\hbar)$  的量子修正。第二项是阻尼项。第三项是  $W$  在动量空间中的扩散, 扩散系数为  $D$  (式(4.8.12))。实际上, 扩散项的效应是简单的。由于式(4.8.10)中的振荡项  $\cos\left(\frac{\Delta x}{\hbar} p\right)$  是  $\frac{\partial^2}{\partial p^2}$  的本征函数, 扩散项倾向于减少振荡项, 其衰减

率为  $\tau_D^{-1} = 2m\gamma kT \left(\frac{\Delta x}{\hbar}\right)^2$ 。图 4.20(a) 中的负值谷将在  $\tau_D$  时间量级被基本填平(图 4.20(b))。

这时就可以给  $W$  以概率分布的诠释。分布形成两个在  $x$  和  $p$  都是高斯型分布的波包, 相当于在相空间中的两个点, 它们的出现是等概率的。在这个例子中, 退相干和阻尼是联系在一起的。

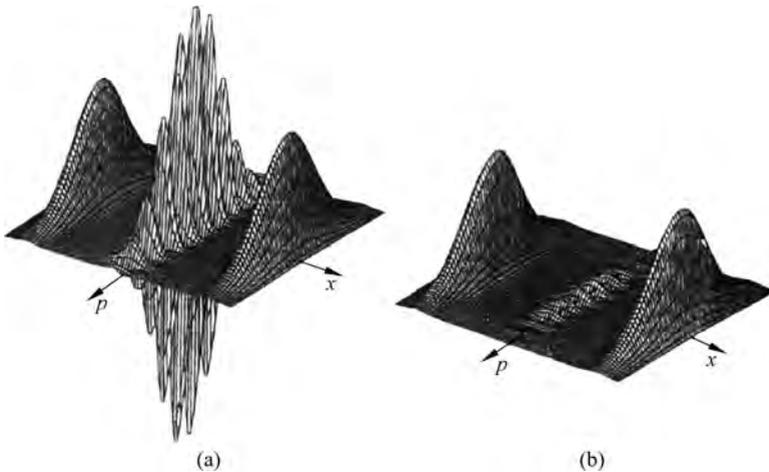


图 4.20 阻尼导致退相干

取自文献[25]

(a) 相干波包叠加的维格纳分布; (b) 分布在动量空间扩散导致去相干

前面几节从量子力学规律的普遍性出发,讨论了宏观体系在环境的影响下退相干而显示出经典性质的情况。与此平行的还有另外一个问题,宏观体系是否有可能保持量子力学的性质呢?超流与超导的发现给人们以启示,某些宏观的粒子体系也有量子力学性质。环境的作用仍是重要的,但在一定条件下,相位的相干性仍能保持,这将在第6章中讨论。问题的两个方面实际上支持一个统一观点:量子力学的规律是普遍的,既适用于微观体系,也适用于宏观体系。在某些条件下,宏观体系显示量子行为,例如具有约瑟夫森结(Josephson junction)的超导环,或是重以吨计的引力波探测器;而在其他条件下作为量子力学定律的后果,显示经典行为。

退相干与波包编缩究竟是量子力学的推论,还是需要从量子力学之外给予假设,物理学家的意见是有分歧的。在20世纪60—70年代,第一种观点属于少数,从20世纪70年代起,持这种观点的人数持续增加。在这个方向上也有各种不同的、具体的实现方式<sup>[33-35]</sup>。这里只介绍了Zurek的观点,他的文章<sup>[25]</sup>发表后引起了激烈的讨论<sup>[36]</sup>。

上文讨论的很多模型都是专门设计的,以通过实现一个宏观极限达到理解经典性的量子原因的目的。其共同的面貌是量子体系在环境的连续监察之下,其他所有的结果则是因模型与施加条件的不同而异。Anglin, Paz 和 Zurek 指出了这个特征,并且强调了以下三点:

(1) 对一个作为两个相隔高斯态相干叠加的线性布朗振子(它们从原点被移动相等且相反的距离 $\pm a$ ),它的相干时间标度为

$$\tau'_d = \frac{\hbar^2}{8M\gamma a^2 k_B T}$$

此式不是普适的。对低温或非欧姆阻尼环境,退相干速率 $D(t)$ 一般不是线性的,退相干时间将是 $T$ 和 $a$ 的复杂函数。

(2) 始态制备。如果在开始时有爆发,其后就会有很快的退相干,这可能源于在始态中体系和环境很少缠绕。如在上例中,始态不是叠加高斯态,而是体系的基态,然后施加外力将布朗振子在一定时间内驱动到叠加高斯态,退相干即被抑制,不会发生起始的爆发。

(3) 退相干随增加的距离 $a$ 而饱和。在以上情况1和情况2中,退相干时间与 $a^2$ 成反比。在有的模型中,粒子与线性环境有准定域的非线性相互作用,退相干率就不再无限制地随 $a^2$ 增加,而是在一定的时间饱和。

Anglin, Paz 和 Zurek 做出结论,从量子到经典体制的研究应该依据个案具体研究。在低温和非欧姆阻尼环境下,退相干很复杂,甚至在线性系统中也是如此:噪声可能是有色的(与频率有关),耗散项具有记忆(非马尔可夫过程),逆反应会有剧烈的效应。一般来说,退相干依赖于所有这些特征。最后他们建议,在一个很宽的范围调节退相干的实验。这个建议被 Sonnentag 和 Hasselbach 实现。在实验中,从源发射的电子波被带有负电的双棱镜丝分开并互相远离。静电四极将它们导向相互趋近。在相遇之前,它们在很小的高度 $z$ 处通过一个有电阻的平面,横向相距 $\Delta x$ 。感应电荷和电子波束一起运动,导致平面内的电子和声子气体的扰动,形成电子和平面的缠绕(图4.21的阴影处)。“走哪一条路”的信息随 $z$ 的减小而增加,导致干涉图样的可见度减小。干涉图示于图4.22。可以看到横向距离 $\Delta x$ 的增加导致了退相干的增加和角向相干的减小。

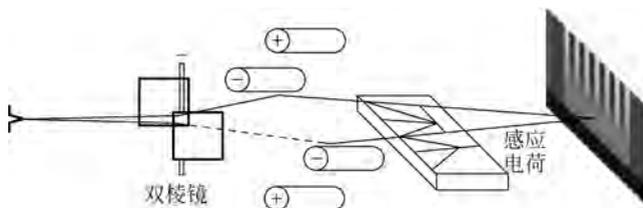


图 4.21 实验示意图

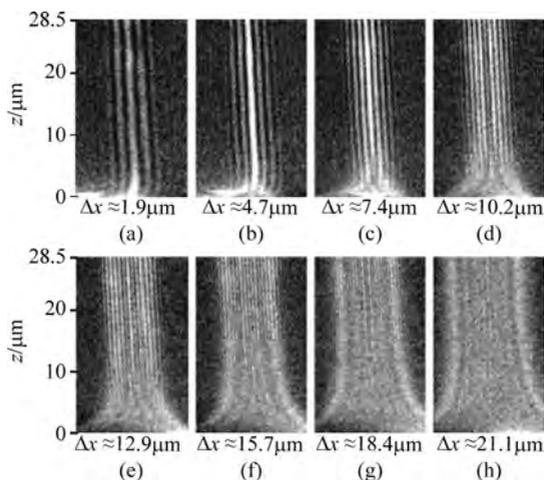


图 4.22 电子干涉图

## 4.9 实验室中实现的“薛定谔的猫”

一个量子力学体系(可以是微观的,也可以是宏观的)处于两个状态的相干叠加状态之中,而这两个状态必须是在宏观上可以区别的,该体系就是一只“薛定谔的猫”。“宏观上可区别”的意义需针对具体情况讨论。

### 4.9.1 单原子级的“薛定谔的猫”

1996年有两份关于在实验室中制备了“薛定谔的猫”的报道。NIST 研究组(D. Wineland 和 C. Monroe 等人)<sup>[37-39]</sup>实现的是单原子级的“薛定谔的猫”。在这里,“宏观上可区别”的意思是一个原子处于在空间上明确分离的两个谐振子相干态的叠加态上。 ${}^9\text{Be}^+$ 离子( $n=2$ , 有一个电子)经激光冷却被捕陷于离子阱中。离子阱相当于一个三维谐振子势  $\frac{1}{2\pi}(\omega_x, \omega_y, \omega_z) = (11.2, 18.2, 29.8)\text{MHz}$ 。离子的有关电子能级是  ${}^2S_{1/2}(F=2, m_F=-2)$  和  ${}^2S_{1/2}(F=1, m_F=-1)$ , 分别用  $|\downarrow\rangle_i$  及  $|\uparrow\rangle_i$  表示,  $i$  为内部运动, 括号中是与超精细结构有关的量子数。 ${}^9\text{Be}$  核自旋为  $3/2$ , 核自旋与电子自旋耦合生成总自旋  $\mathbf{F} = \mathbf{s} + \mathbf{I}$ ,  $F=2$  或  $1$ ,  $m_F$  是  $\mathbf{F}$  的投影。量子化轴由外加磁场  $\mathbf{B}$  提供, 离子的内部运动(电子能级)和质心运动(在谐振子场中)通过激光束调控。图 4.23(a) 给出  $|\uparrow\rangle_i$  和  $|\downarrow\rangle_i$  间的超精细劈裂是  $\omega_{\text{HF}} = 1.250\text{GHz}$ 。它们又各有标为  $0, 1, 2, \dots$  的态。这是质心运动的谐振子量子数。 $|\uparrow\rangle_i$  和

$|\downarrow\rangle_i$  通过激光束  $a$  与  $b$  实现二光子耦合。 $a$  和  $b$  的频差为  $\omega_{\text{HF}}$ , 分别能将  $|\downarrow\rangle_i$  和  $|\uparrow\rangle_i$  激发到  ${}^2P_{1/2}(2, -2)$  附近的虚能级上, 失谐  $\Delta \approx -12\text{GHz}$ 。这样  $|\uparrow\rangle_i$  和  $|\downarrow\rangle_i$  通过二光子过程(以虚能级为中间态)往返跃迁(拉比振荡)。这种耦合称为“二光子拉曼耦合”。离子的内部(电子)态就是  $|\uparrow\rangle_i$  和  $|\downarrow\rangle_i$  的相干叠加, 相关实验步骤如下。

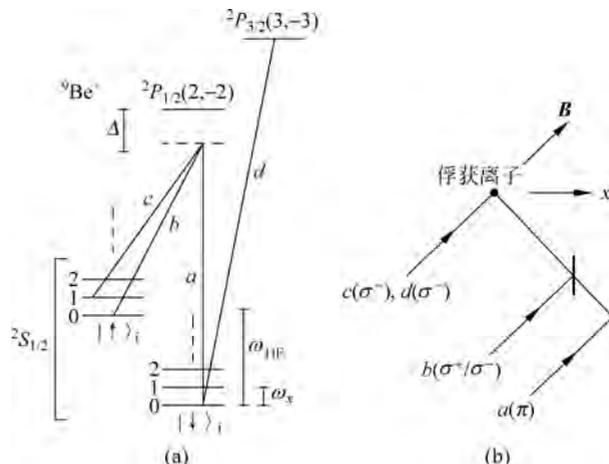


图 4.23 二光子拉曼耦合产生“薛定谔的猫”

取自文献[37]

(a)  ${}^9\text{Be}^+$  离子的电子能级与质心运动能级; (b) 激光束的几何及偏振状态和外磁场方向

(1) 通过调节激光束  $a$  和  $b$  (称为“载带束”) 的照射时间控制叠加系数的大小。例如, 在开始时离子处于  $|\downarrow\rangle_i$  态(图 4.24(a)), 则用  $\pi/2$  脉冲(时间为  $1/4$  拉比周期)可使  $|\uparrow\rangle_i$  态和  $|\downarrow\rangle_i$  态的权重相同。产生的态为(图 4.24(b))

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [ |\downarrow\rangle_i |0\rangle_e - ie^{-i\mu} |\uparrow\rangle_i |0\rangle_e ] \quad (4.9.1)$$

此处  $|0\rangle_e$  代表质心运动基态,  $e$  是外部运动之意。载带使两个态间产生一定相差。实验中共使用了三次载带束, 相角是相对的。以最后一次载带为标准, 设定它的相角为 0。此次相角为  $-\mu$ , 从  $|\downarrow\rangle_i$  到  $|\uparrow\rangle_i$  的相因子为  $-ie^{-i\mu}$ 。

(2) 为了使叠加(式(4.9.1))成长为两个宏观可区别的态的相干叠加, 利用对质心运动的调控, 把它们分开一个宏观的距离。方法是使用“移位”激光束  $b$  和  $c$ , 它们的频差为  $\omega_x/2\pi = 11.2\text{MHz}$ , 正好使两个相邻的  $x$  方向的谐振子态二光子拉曼耦合起来。通过较长的照射时间, 可以使核心运动  $|0\rangle_e$  跃迁到相干态:

$$|\beta\rangle_e = e^{-|\beta|^2/2} \sum_n \frac{\beta^n}{(n!)^{1/2}} |n\rangle_e$$

此处

$$\beta = \alpha e^{i\theta}$$

$\alpha$  和  $\theta$  为实数, 见图 4.24(c)。相干态的平均量子数为  $\langle n \rangle = \alpha^2$ , 相应的谐振子振幅为  $2\alpha \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_x}}$ 。通过激光束的偏振  $a(\pi), b(\sigma^+/\sigma^-), c(\sigma^-)$ <sup>①</sup>, 可以使移位束只影响内部态  $|\uparrow\rangle_i$ ,

①  $\sigma$  与  $\pi$  分别为平行于和垂直于外磁场(激光束)方向, 见图 4.23(b)。

因为  $c$  的偏振态  $\sigma^-$  不能将内部态  $|\downarrow\rangle_i$  和任何虚<sup>2</sup>  $P_{1/2}$  态耦合起来。移位束使内部态和外部态产生缠绕。从  $\omega_x$  的数值给出  $x_0 = 7.1 \text{ nm}$ , 这是相干态波包的均方根大小。操作后的状态为

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\rangle_i |0\rangle_e - ie^{-i\nu} |\uparrow\rangle_i |\alpha e^{-i\phi/2}\rangle_e) \quad (4.9.2)$$

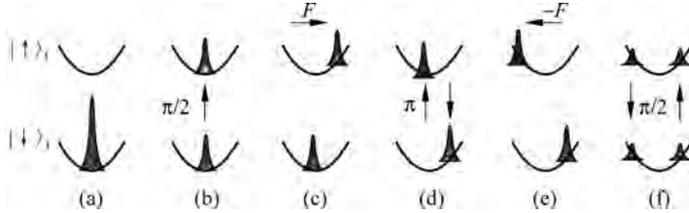


图 4.24 与内部态缠绕的波包演化

取自文献[37]

- (a) 波包初始位置; (b) 第一次载带  $\pi/2$  脉冲,  $0.5 \mu\text{s}$ ; (c) 移位, 约  $10 \mu\text{s}$ ;  
(d) 第二次载带  $\pi$  脉冲,  $1.0 \mu\text{s}$ ; (e) 移位, 约  $10 \mu\text{s}$ ; (f) 第三次载带  $\pi/2$  脉冲,  $0.5 \mu\text{s}$

往  $X$  正向的移位束产生的相干态相位为  $-\phi/2$ 。图 4.24 中的抛物线代表谐振子势能。

(3) 为了扩大两个叠加态的距离, 先使它们内部态互换: 用  $\pi$  脉冲 (时间为  $\frac{1}{2}$  拉比周期) 载带束使  $|\uparrow\rangle_i \rightarrow |\downarrow\rangle_i$ ,  $|\downarrow\rangle_i \rightarrow |\uparrow\rangle_i$ 。载带束的相角为  $\nu$ 。  $|\uparrow\rangle_i \rightarrow |\downarrow\rangle_i$  跃迁带来的相因子为  $-ie^{i\nu}$ 。操作后的状态为(图 4.24(d))

$$\Psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (ie^{-i\nu} |\uparrow\rangle_i |0\rangle_e + e^{i(\nu-\mu)} |\downarrow\rangle_i |\alpha e^{-i\phi/2}\rangle_e) \quad (4.9.3)$$

式中弃去了两项共同的负号。

(4) 使用移位束两次, 将  $|\uparrow\rangle_i, |0\rangle_e$  移向  $-x$  方向, 相位为  $\phi/2$ 。  $|\downarrow\rangle_i$  态不受影响, 操作后的状态为(图 4.22(e))

$$\Psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} (ie^{-i\nu} |\uparrow\rangle_i |\alpha e^{i\phi/2}\rangle_e + e^{i(\nu-\mu)} |\downarrow\rangle_i |\alpha e^{-i\phi/2}\rangle_e) \quad (4.9.4)$$

此时两态相距达到最大。这时状态和“薛定谔的猫”最相似。离子只有一个, 它的状态是两态的相干叠加。两态的内部状态不同, 外部运动是高斯波包, 相距一定的距离。对波包大小而言, 这个距离是真正“宏观”的: 实验中这个距离最大达到  $80 \text{ nm}$ , 而单个波包的大小约为  $7 \text{ nm}$ , 原子大小是  $0.1 \text{ nm}$ 。

(5) 最后使用载带束  $\pi/2$  脉冲, 使  $|\uparrow\rangle_i$  和  $|\downarrow\rangle_i$  各一分为二。操作后的状态为(图 4.22(f))

$$\Psi_5 = \frac{1}{2} |\downarrow\rangle_i (|\alpha e^{-i\phi/2}\rangle_e - e^{i\delta} |\alpha e^{i\phi/2}\rangle_e) - \frac{i}{2} |\uparrow\rangle_i (|\alpha e^{-i\phi/2}\rangle_e + e^{i\delta} |\alpha e^{i\phi/2}\rangle_e) \quad (4.9.5)$$

此处载带束的相位为  $0$  (标准), 上式中弃去了公共相因子  $e^{i(\nu-\mu)}$ ,  $\delta = \mu - 2\nu + \pi$ 。  $\Psi_5$  可以进一步改写为

$$\Psi_5 = |\downarrow\rangle_i |S_-\rangle_e - i |\uparrow\rangle_i |S_+\rangle_e \quad (4.9.6)$$

此处

$$|S_\pm\rangle_e = \frac{1}{2}(|\alpha e^{-i\phi/2}\rangle_e \pm e^{i\delta} |\alpha e^{i\phi/2}\rangle_e) \quad (4.9.7)$$

对于  $\phi = \pi, \delta = 0$ ,  $|S_\pm\rangle_e$  称为“偶猫”和“奇猫”。

通过实验可以测量  $P_\downarrow(\phi)$ , 即离子内部状态处于  $|\downarrow\rangle_i$  的概率。探测的方法是用探测激光束  $d$  照射离子(图 4.23(a)), 将  ${}^2S_{1/2}(2, -2)$  激发到  ${}^2P_{3/2}(3, -3)$  态, 然后观测散射荧光。 $P_\downarrow(\phi)$  是外部运动相位  $\phi$  的函数。与内部运动  $|\downarrow\rangle_i$  关联的是  $|S_-\rangle_e$ 。随  $\phi$  的不同,  $|S_-\rangle_e$  的两项所代表的波包距离也不同, 当波包距离近时, 干涉效应显著。波包的概率分布是  $|\langle x | S_-\rangle_e|^2$ , 考虑到随时间的演化,  $\phi$  是随时间线性变化的(式(4.1.45))。对于  $\delta = 0$  的情况, 当  $\phi = \pm\pi$  时, 两个波包相距最远; 当  $\phi = 0$  时, 两个波包重合。但由于  $\delta = 0, S_-$  是“奇猫”, 两个波包正好抵消。 $P_\downarrow(\phi)$  正是分布函数对  $x$  的积分:

$$\begin{aligned} P_\downarrow(\phi) &= \int_{-\infty}^{\infty} |\langle x | S_-\rangle_e|^2 dx \\ &= \frac{1}{2} [1 - e^{-\alpha^2(1-\cos\phi)} \cos(\delta + \alpha^2 \sin\phi)] \end{aligned} \quad (4.9.8)$$

对于足够大的  $\alpha$ ,  $P_\downarrow(\phi)$  在  $\phi = 0$  附近显示振荡行为, 这是两个波包干涉的表现(用猫的比喻, 这是活猫与死猫的干涉)。对于  $\delta = 0$ ,  $P_\downarrow(\phi)$  作为  $\phi$  的函数对不同  $\alpha$  值的情况绘于图 4.25。实验步骤不断重复进行: 冷却, 制备状态, 探测, 同时改变着相干态的相位  $\phi$ 。图 4.25(a)~图 4.25(d) 是实验(点)和理论(点)的比较, 图 4.25(e) 是理论曲线。如果退相干发生, 两个波包没有固定相位关系, 则  $P_\downarrow(\phi) = \frac{1}{2}$ 。每个系列的测量都对应一定的  $\delta$  值。可以

用挡住移位束的方法( $\alpha = 0$ )求得  $\delta$ , 此时  $P_\downarrow(\phi) = \sin^2 \frac{\delta}{2}$  可以直接给出  $\delta$ 。 $P_\downarrow(\phi)$  与  $\phi$  的关系因  $\delta$  的不同而不同。图 4.26 给出了  $\alpha \approx 1.5$  时不同  $\delta$  值对应的  $P_\downarrow(\phi)$ 。图 4.26(a) 的  $\delta = 1.03\pi$ , 接近偶猫, 因此在  $\phi = 0$  处对应相长干涉。图 4.26(b) 的  $\delta = 0.48$ 。图 4.26(c) 的  $\delta = 0.06\pi$ , 接近奇猫, 在  $\phi = 0$  处是相消干涉。

在实验室实现“薛定谔的猫”并进行退相干研究, 除在量子力学基本原理方面有重要意义外, 对有潜在应用可能的量子计算机也是十分重要的。量子计算机在完成计算以前必须保持相干叠加状态, 因此退相干时间成为它至关重要的指标。上文描述的实验还不能对退相干时间进行测量, NIST 研究组<sup>[40]</sup>在上述实验的基础上进行了退相干速率的研究, 如图 4.27 所示。在实验中, 退相干是由体系(俘获原子)和一个设计好的环境库的耦合诱导的, 而这个耦合是能够控制的。系统是两个相干态的叠加:

$$|\phi\rangle = N(|\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle) \quad (4.9.9)$$

它和环境库的耦合是通过相互作用实现的, 相互作用正比于系统振动与环境的涨落幅的乘积。一个定标律<sup>①</sup>给出在退相干过程中的剩余相干性  $C(t)$ :

$$C(t) = e^{-|\alpha_1 - \alpha_2|^2 \xi t} \quad (4.9.10)$$

① 参阅 D. F. Walls, G. J. Milburn. *Quantum Optics*. Springer, 1994.

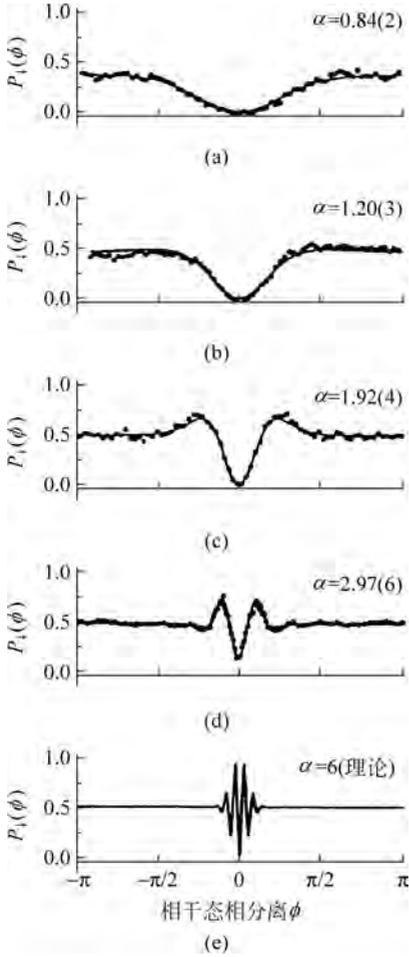


图 4.25  $\delta=0$  时  $P_{\downarrow}(\phi)$  的实验与理论比较  
取自文献[37]

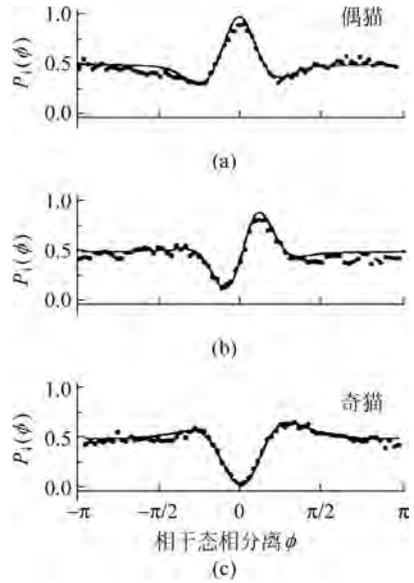


图 4.26 不同  $\delta$  值时的  $P_{\downarrow}(\phi)$   
取自文献[37]

此处  $\zeta$  是体系与环境库的耦合,  $|\alpha_1 - \alpha_2|$  可以看作两个状态  $\alpha_1$  和  $\alpha_2$  在“希尔伯特空间中的距离”, 或“叠加的大小”。库中的内容是沿俘获阱轴方向的准随机电场, 场的频率在粒子轴向运动的频率附近振荡。叠加的相干性由单原子干涉仪测量。从离子  $F=1, m_F=1$  的自旋初态(记为  $|\downarrow\rangle$ )和外部运动的基态出发, 用文献[39]描述的实验方法制备猫态。制备之后就将猫态和库耦合起来。然后将制备过程逆转以获得干扰后的叠加。最后确定结果状态的相干性。研究<sup>[40]</sup>得出离子在  $|\downarrow\rangle$  态的概率是

$$P_{\downarrow} = \frac{1}{2} (1 - e^{-2|\Delta\alpha|^2\sigma^2} \cos\delta) \tag{4.9.11}$$

此处  $\sigma^2 \propto \langle V^2 \rangle$ ,  $V$  是施加的随机电压,  $\delta$  是最后一个载带束与第一个载带束间的相差。结果示于图 4.27, 此处条纹对比度定标在  $\langle V^2 \rangle=0$  时为 1。叠加大小  $|\Delta\alpha|$  与位移束脉冲时间线性相关。实验数据与理论符合得很好。

一个单原子能看成“猫”吗? 对于此物理学家的意见产生了分歧。Zurek 认为应该称它是“薛定谔的猫”的“仔”。

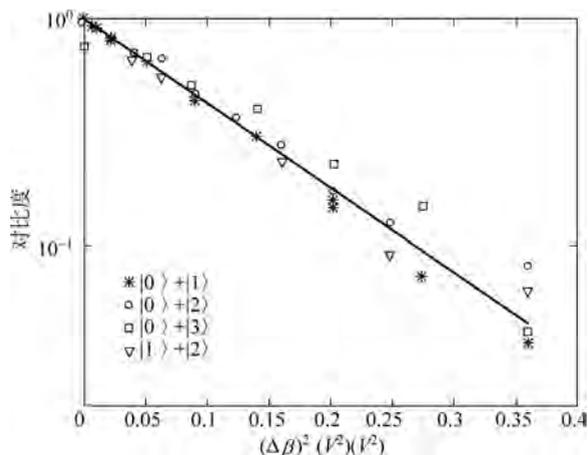


图 4.27 与环境相库耦合的福克态叠加的退相干  
取自文献[40]

#### 4.9.2 薛定谔的位相猫

阿罗什的研究组<sup>[41]</sup>利用腔量子电动力学方法制备了腔中电磁振荡相干态的叠加<sup>①</sup>。图 4.28 是实验装置示意图。图中 C 是高品质超导(Nb)腔。Rb 原子从炉 O 中引出,经过选定激光束激发之后,从盒 B 出来的是速度确定的位于“圆里德伯态” $n=51, l=50$  的 Rb 原子。控制激光脉冲使原子间隔够大,通过超导腔的是单个原子(间隔 1.5ms)。将低 Q 腔  $R_1$  调到与  $n=51, l=50$ (称为“e”)至  $n=50, l=49$ (称为“g”)态跃迁频率( $\nu_0=51.099\text{GHz}$ )共振,并在  $R_1$  上加共振  $\pi/2$  脉冲,使原子处于叠加态  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|e\rangle+|g\rangle)$ 。原子进入微波源 S 激励的超导腔 C,将 C 的频率调到与  $\omega_{eg}$  的失谐为  $\delta$ ,腔中的电磁场是格劳伯相干态  $|\alpha\rangle$ <sup>②</sup>:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{(n!)^{1/2}} |n\rangle$$

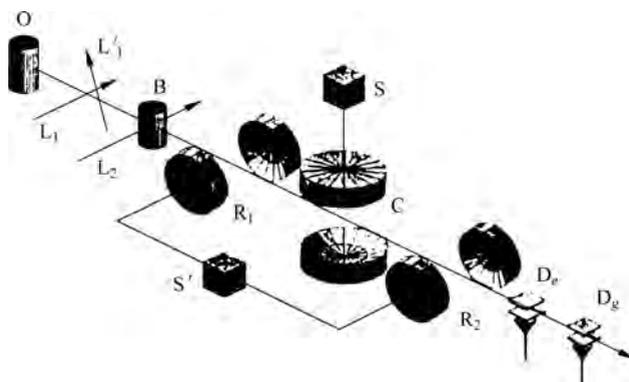


图 4.28 阿罗什实验装置示意图  
取自文献[41]

① 形成纠缠态的叠加的物理过程将在本书 8.2 节讨论,见式(7.3.16)。

② 见本书 4.1 节的正则相干态,此处  $n$  代表光子数。

由于失谐, 原子通过腔时不能发生  $|e\rangle$  与  $|g\rangle$  之间的跃迁, 但由于原子与场的相互作用,  $|e\rangle$  与  $|g\rangle$  使场发生不同的相移<sup>①</sup>。因此  $|e\rangle$  和  $|g\rangle$  的相干产生了场的状态的相干。体系状态为

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|e, \alpha e^{i\phi}\rangle + |g, \alpha e^{-i\phi}\rangle) \quad (4.9.12)$$

相移  $\phi$  与失谐  $\delta$  有关, 且与  $\delta$  成反比。因叠加态由相位  $\phi$  和两分量的距离  $D$  所表征, 此处  $D = \alpha e^{i\phi} - \alpha e^{-i\phi} = 2\alpha \sin\phi$ , 叠加态可以称为“相位移猫”, 如果  $D$  能达到  $O(1)$  量级。通过调节失谐可以得到不同的  $\phi$ 。  $R_2$  是与  $R_1$  结构相同的腔, 用同样的微波源  $S'$  激励 ( $\pi/2$  脉冲)。原子在离开腔  $C$  以后通过  $R_2$ 。最后原子通过探测器  $D_e$  和  $D_g$ , 它们是场电离探测器, 施加不同的电压。  $D_e$  的电压低, 刚好使  $|e\rangle$  态原子电离。  $D_g$  的电压高些, 能使  $|g\rangle$  态原子电离。调节微波源  $S'$  的频率  $\nu$ , 使它扫过  $\nu_0$ , 测量  $P_g^{(1)}(\nu)$ , 即原子处于  $|g\rangle$  态的概率。在 10min 内记录了 50 000 个事件, 结果示于图 4.29(a)。它表明当  $C$  中无场时,  $P_g^{(1)}(\nu)$  会显示拉姆齐条纹<sup>②</sup>, 这是因为原子受到相隔  $T = 230\mu\text{s}$  的两次脉冲 ( $R_1$  和  $R_2$ )。因  $e \rightarrow g$  跃迁可能发生在  $R_1$ , 也可能发生在  $R_2$ , 两种不同可能的“路径”不可区别, 在探测器处复合而发生量子干涉。图 4.29(b)~图 4.29(d) 在  $C$  中有场的存在,  $|\alpha| = \sqrt{9.5} = 3.1$ , 即场平均光子数为 9.5, 失谐值分别为  $\delta/2\pi = 712\text{kHz}$ ,  $347\text{kHz}$  和  $104\text{kHz}$ 。两种场的不同相位情况画在右侧插图内, 插图中的直线夹角为  $\phi$ 。从图中可以看出除条纹移动外, 条纹对比度明显地随  $\phi$  的增加而减小。原子离开  $C$  时处于式 (4.9.12) 所示的状态。当  $\phi$  很小时, 测量场的相位所能给出的

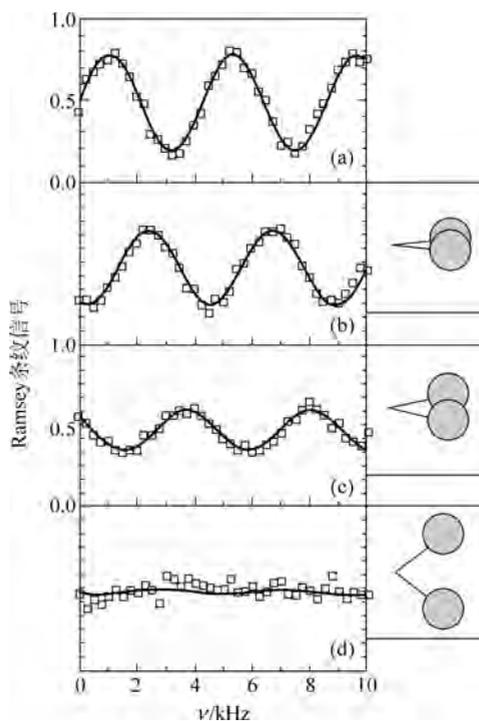


图 4.29  $P_g^{(1)}(\nu)$  表现出拉姆齐条纹

取自文献[41]

① 请参阅本书 8.6 节。

② 关于拉姆齐干涉仪, 请参阅本书 8.6 节。

关于原子状态的信息不多,因此两条不同路径的干涉比较明显。当  $\phi$  增大时,测量场的相位给出有关原子的信息增加,因此干涉必然减弱。

从图 4.26 可以看到,场的两种状态(相角  $\phi$  和  $-\phi$ )越是接近宏观可分辨( $|\phi|$ 较大),相干越弱,故明确给出了相干的宏观可分辨态。这个实验通过测量原子的状态给出了在一定距离以外的腔 C 中场的状态。此外,如果不放置腔  $R_2$ ,则场的状态是式(4.9.12)。测得原子位于  $|e\rangle$  或  $|g\rangle$  给出的远处场的状态是  $\phi$  和  $-\phi$ 。但如果放置  $R_2$ ,它会再次混合两个里德伯态  $|e\rangle$  和  $|g\rangle$ 。调节  $S'$  脉冲的相位,可使通过  $R_2$  的原子位于  $(|e\rangle + |g\rangle)/\sqrt{2}$  和  $(|g\rangle - |e\rangle)/\sqrt{2}$ ,而场的状态不变。原子通过  $R_2$  后的体系波函数变为

$$\psi_2 = |e\rangle \frac{|\alpha e^{i\phi}\rangle - |\alpha e^{-i\phi}\rangle}{\sqrt{2}} + |g\rangle \frac{|\alpha e^{i\phi}\rangle + |\alpha e^{-i\phi}\rangle}{\sqrt{2}} \quad (4.9.13)$$

此时,测得原子位于  $|e\rangle$  或  $|g\rangle$  给出的场状态相应地是  $(|\alpha e^{i\phi}\rangle - |\alpha e^{-i\phi}\rangle)/\sqrt{2}$  和  $(|\alpha e^{i\phi}\rangle + |\alpha e^{-i\phi}\rangle)/\sqrt{2}$ 。这不仅体现了远距离的量子关联(“非定域性”),而且可将是否放置  $R_2$  作为推迟选择:待原子通过腔后再做选择,结果是不同选择给出了场的不同状态。

这个实验的优越性还在于能对退相干进行研究。第一个原子在腔中产生了两个宏观可区别的场状态(相角  $-\phi$  和  $\phi$ )。再发出一个原子通过腔,对场再产生相移,结果是出现了三种场,相移为  $-2\phi, 0, +2\phi$ 。相移为 0 的这个分量有两种可能。其一是第一个原子以  $e$  状态通过,第二个原子以  $g$  状态通过(记为  $(e, g)$ ),其二是  $(g, e)$ 。这两种可能不能区分,因此在测量联合概率  $P_{ee}^{(2)}, P_{eg}^{(2)}, P_{ge}^{(2)}, P_{gg}^{(2)}$  时会有干涉。定义“二原子关联信号” $\eta$ :

$$\eta = \frac{P_{ee}^{(2)}}{P_{ee}^{(2)} + P_{eg}^{(2)}} - \frac{P_{ge}^{(2)}}{P_{ge}^{(2)} + P_{gg}^{(2)}} \quad (4.9.14)$$

如果场处于量子相干(叠加)态  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha e^{i\phi}\rangle \pm |\alpha e^{-i\phi}\rangle)$ ,则  $\eta$  是常数。如果场变为非相干的统计混合,则  $\eta$  为 0。图 4.30 给出了  $\eta$  和  $\tau/T_r$  的关系, $\tau$  是两个原子通过腔的时间间隔, $T_r$  是腔的品质因数  $Q$  所决定的光子平均寿命(实验用的  $T_r = 160\mu\text{s}$ )。可以看出,当  $\tau/T_r$  接近 1 时, $\eta$  已趋于 0,即相干已不存在。此外,退相干的时间与  $\phi$  的大小有关,当  $\phi$  较大时,退相干的时间要短得多。

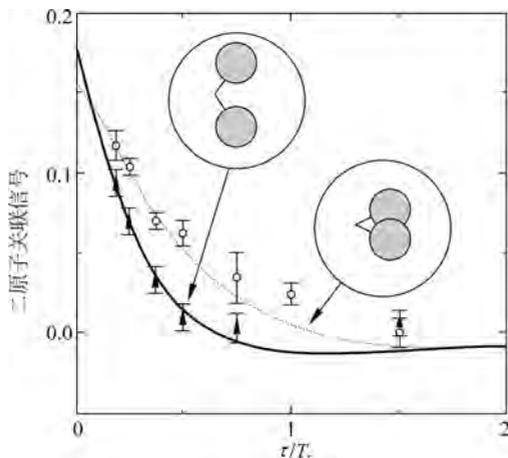


图 4.30 二原子关联信号与  $\tau/T_r$  关系

取自文献[41]

关于退相干和实验室中实现“薛定谔的猫”的内容, 可以参阅文献[42]。

### 4.9.3 宏观“薛定谔的猫”

纽约州立大学石溪校区研究组(C. J. Friedman)<sup>[43]</sup>在实验上验证了 SQUID(超导量子干涉装置)的宏观量子相干现象, 直接测量了叠加态的隧穿劈裂。在 19 世纪 50 年代, 波戈留波夫引入了超导体中库珀对凝聚的波函数, 建立了宏观量子体系的概念。约瑟夫森体系一直是宏观量子现象的研究对象<sup>①</sup>。SQUID 是一个电感为  $L$  的超导环, 环中嵌有一个电容为  $C$ 、极限电流为  $I_C$  的约瑟夫森隧穿结。在平衡时可以有超导电流  $I$  流经环中, 其产生的磁通量  $LI$  通过环中空间。当有外加磁通  $\Phi_x$  (与超导电流的磁通方向相反) 时, 合成磁通量为  $\Phi = \Phi_x - LI$ 。库珀对的波函数是单值的, 因此波函数的相位沿环连续变化(除去在约瑟夫森结处), 当绕行一周回到原处时, 相位的变化必须为  $2\pi$  的整数倍( $f$  倍)。量子数  $f$  定义为 SQUID 环的通量态(fluxoid state)。当  $f=0$ (或 1) 时, 超导电流抵消(或加强)外加通量  $\Phi_x$ 。在实验中, 超导电流大于  $1\mu\text{A}$ , 相当于每秒  $10^6$  个库珀对的流动, 产生的磁矩可达  $10^{10}\mu_B$ 。可以认为这个体系是宏观的。SQUID 的动力学原理可以用穿过环中空间的磁通描述<sup>②</sup>, 体系的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2}C\dot{\Phi}^2 + V(\Phi) \quad (4.9.15)$$

式(4.9.15)右侧的第一项相当于动能, 第二项是势能,

$$V(\Phi) = \frac{(\Phi_x - \Phi)^2}{2L} - I_C \frac{\Phi_0}{2\pi} \cos 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad (4.9.16)$$

此处  $\Phi_0$  是磁通量子。对  $\Phi_x = \Phi_0/2$ , 势能  $V(\Phi)$  是对称双阱, 示于图 4.31。当  $\Phi_x$  偏离此值时, 双阱是不对称的, 示于图 4.32(a)。两个通量态  $f=0$  和  $f=1$  相当于分别位于左阱和右阱的态。双阱是量子力学中一个有趣的话题。先考虑双阱中有一个粒子。低能量态  $|L\rangle$  和  $|R\rangle$  主要分别局域在左阱和右阱中, 能量是简并的。当能级的能量越来越高时, 隧穿阱间势垒的概率已不能忽略,  $|L\rangle$  和  $|R\rangle$  混合起来, 能量本征态变为  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle \pm |R\rangle)$ , 它们的能量差  $\Delta$  被称

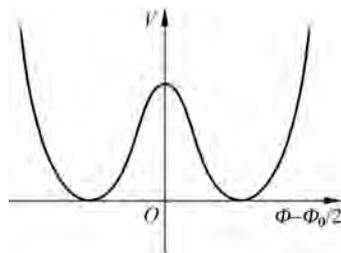


图 4.31 SQUID 对称双阱

为“隧穿劈裂”, 因为兼并是由于隧穿取消的。对称的叠加是基态。如果最初在左阱制备好  $|L\rangle$  态(由于隧穿不可忽略, 它已经不再是本征态了), 体系的状态将在  $|L\rangle$  与  $|R\rangle$  之间周期性振荡, 频率为  $\Gamma = \Delta/\hbar$ 。这就是量子相干问题。它对于形成如  $\text{NH}_3$  这样的分子的化学键是很重要的<sup>③</sup>。问题在于, 在如 SQUID 的宏观体系中, 叠加态  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|L\rangle \pm |R\rangle)$  是否仍然有意

① 见本书 6.1 节~6.3 节。

② 虽然  $\Phi$  在一般情况下是宏观的, 但显示量子行为。通量正比于超导电流, 且与波函数的相位有关。在哈密顿量式(4.9.15)中, 电容能量要小得多, 因此  $\Phi$  可以在相位-粒子数不确定关系的限制下充分准确地描述, 因为粒子数是宏观量, 一定的误差是允许的。

③ 参阅 *The Feynman Lectures on Physics*, 卷 III, 8.6 节。

义。单粒子的量子相干源于隧穿,但对于永远和环境耦合的宏观体系,问题要复杂得多。在1983年 A. Caldeira 等人给出了对这个问题的系统回答<sup>①</sup>。如果体系和环境耦合很弱,体系仍能正常隧穿,叠加态就仍是体系的本征态,有隧穿劈裂。它们是宏观猫态。如果耦合是中等强度,隧穿仍有可能,但体系的隧穿不再是相干的了,即在阱间的跳跃已经不再是周期性的,而是随机的。这称为“断续跳跃”。“薛定谔的猫”态就没有意义了。在此前,SQUID 的共振隧穿已在实验中被验证<sup>[32]</sup>。线性叠加的验证在于直接测量隧穿劈裂。为了这个目的,仔细考虑状态  $|g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$  和  $|e\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$  的能量随式(4.9.16)中的参数变化。参数包括倾斜度  $\epsilon$  和在  $\epsilon=0$  时的势垒高度  $\Delta U_0$ (图 4.32(a))。在  $\epsilon$  增加时,  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  的能量分别增加和减小,如图 4.32(b)所示。在  $\epsilon=0$ (对称阱)时,它们可能会交叉。但交叉不会发生,因为隧穿撤销了简并。这被称为“反交叉”(anticrossing),或“被避免的交叉”(avoided crossing)。隧穿劈裂是很小的,因此难以测量。分辨这个劈裂的必要条件是线宽必须小于  $\Delta$ 。SQUID 对噪声和耗散都极为灵敏,二者都会增加线宽。实验的挑战在于体系和探测仪器的耦合较弱,为了分辨相距甚近的能级需要足够的信号强度以及将系统和外来噪声屏蔽开来。这些都是过去实验观测 SQUID 量子相干失败的原因。图 4.32(c)是实验装置示意图。为了屏蔽噪声,将 SQUID 置于 PdAu 盒内。外加磁通量  $\Phi_{x,dc}$ ,使其通过对约瑟夫森结的作用控制  $\Delta U_0$ (式 4.9.16)。磁通量  $\Phi_x$  控制倾斜度  $\epsilon$ 。dc SQUID 磁强计用以测量伴随磁通量  $\Phi$  的反向数据,这代表 SQUID 状态的隧穿。在实验中用微波脉冲产生“光协助隧穿”来测量两个激发态的反交叉。微波产生激发态面临的势垒要低得多,这使隧穿概率加大,信号增强了很多。

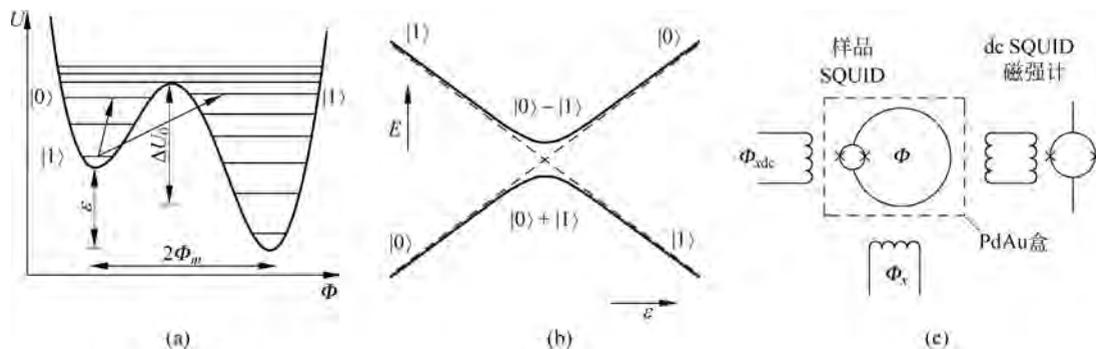


图 4.32 SQUID 共振隧穿实验

取自文献[43]

(a) SQUID 势; (b) 能级反交叉; (c) 实验安排

体系的最初状态在左阱最低态  $|i\rangle$ , 势垒很高, 隧穿可以忽略。施加微波辐射: 当初态和一个激发态的能量差与微波频率匹配时, 体系有相当大的概率被激发, 接着就隧穿到右阱。用数值解法在无阻尼的假设下解以下哈密顿量的能量本征值:

$$H = \frac{1}{2C} p_{\Phi}^2 + V(\Phi, \Phi_x, \Phi_{x,dc})$$

① 参阅本书 6.6 节。

(此处  $p_\phi = -i\partial/\partial\Phi$ ,  $V$  是式(4.9.16)的势), 就得到 SQUID 能级。在图 4.33 中将解出的能级 ( $\Delta U_0 = 9.117\text{K}$ ) 作为  $\Phi_x$  的函数画出(细实线)。计算的势垒顶用粗实线画出。点画线代表被微波辐射激发后的  $|i\rangle$  态。在给定  $\Phi_x$  值时, 这条线与一个激发态相交(用箭头标出), 在此处体系吸收一个光子并隧穿。在垒高  $\Delta U_0 = 8.956\text{K}$  时, 不同的  $\Phi_x$  值对应的能级用虚线代表。不断减小势垒使能级向下移动, 定出反交叉。将光子协助隧穿概率作为  $\Phi_x$  函数, 画出两个峰与反交叉的上下两支相对应。两个峰移动越来越近, 然后远离, 并不相遇。数值计算的能级值与实验符合得很好。Caldeira 等人提出的关于宏观量子相干的理论在 17 年后被证实。

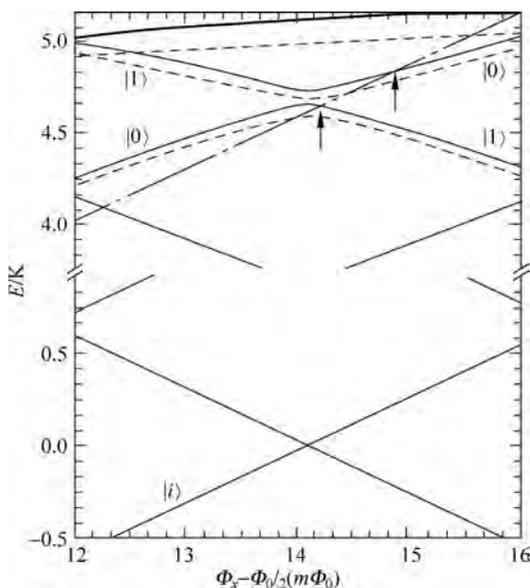


图 4.33 计算出的 SQUID 能级和光子协助隧穿  
取自文献[43]

#### 4.9.4 热辐射发射造成的退相干

量子体系与环境的相互作用把二者缠绕起来, 量子体系的相位就被分配到环境的许多自由度中, 使它不再能被观察到。大分子是研究退相干的极好对象, 因为它具有许多内在模式。在激发能量通过辐射释出时, 因为辐射显示了“哪一条路径”的信息而引起退相干。 $\text{C}^{70}$  分子是很好的例子, 它有 204 个振动模。塞林格领导的维也纳大学研究组<sup>[44]</sup>控制分子在进入干涉仪之前的温度, 通过观测干涉条纹的对比度来研究物质波的退相干。

一束  $\text{C}^{70}$  分子通过聚焦激光束 16 次完成加热阶段。温度受到检测, 发现最热的分子在进入干涉以前的温度约为 3 000K。Talbot-Lau 干涉仪有三个光栅。第一个光栅的作用是提供狭缝的周期阵列, 第二个光栅是衍射元素, 第三个是扫描探测掩膜。通过的分子用激光束电离, 其强度作为在第三光栅处的横向位移的函数被记录下来。条纹可见度  $V = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}}$

表征分子演化的相干性。  $V$  随加热温度的变化示于图 4.34。可见度随加热功率的增加而减小。原因是光子的发射概率随温度增加而增加。当加热功率为 0 时, 光子的发射概率为 47%; 当加热功率为 3W 时为 29%; 当加热功率为 6W 时为 7%; 当加热功率为 10.5W 时

为 0%。绝对计数率先随加热功率  $P$  的增加而上升,然后随加热功率  $P$  的增加而下降,原因是在加热过程中分子会电离和碎裂。

退相干也与分子速度有关:低速分子的归一化可见度随加热功率的增加而下降得更快。退相干与加热功率的关系数据与退相干理论符合得很好<sup>[45]</sup>。

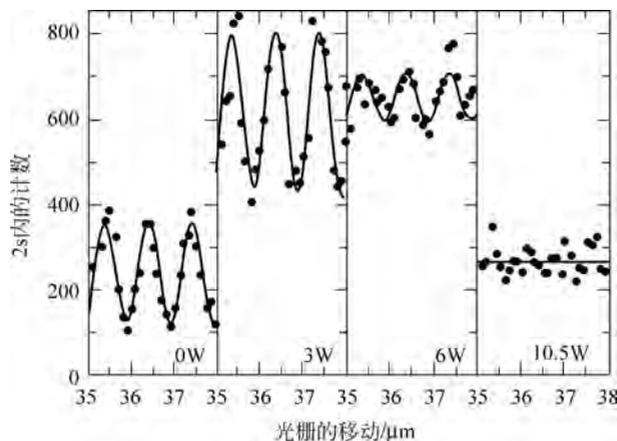


图 4.34 不同加热功率下  $C^{70}$  分子干涉图

取自文献<sup>[44]</sup>

分子速度为  $190\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$

## 4.10 波函数塌缩和量子芝诺效应

冯·诺依曼引入的在测量过程中波函数塌缩的概念在量子力学的标准诠释中应用得很成功。这个概念能够在实验中验证吗? 1977年 Misra 和 Sudarshan<sup>[46]</sup>提出了一个他们称为“量子芝诺效应”(quantum Zeno effect)的验证波函数塌缩概念的方法。考虑一下原子,它由激发态  $\psi_2$  跃迁到基态  $\psi_1$  的自然寿命为  $\tau$ 。设它在时间  $t=0$  时位于激发态。对它进行多次测量,每次测量使波函数塌缩并重新将时钟调零。如果测量进行得足够频繁,到基态的跃迁可以无限地被延迟。当  $t \ll \tau$  时,跃迁概率是

$$P_{2 \rightarrow 1} = \frac{1}{\tau} \quad (4.10.1)$$

如果在时间  $t$  进行测量,则原子仍在激发态的概率是

$$P_2(t) = 1 - \frac{t}{\tau} \quad (4.10.2)$$

如果原子确实在激发态,则波函数塌缩为  $\psi_2$ 。在时间  $2t$  进行第二次测量,原子仍处于激发态的概率是

$$\left(1 - \frac{t}{\tau}\right)^2 \approx 1 - \frac{2t}{\tau} \quad (4.10.3)$$

这个结果和我们没有进行的第一次测量相同,也是可以预料的。

但如果时间  $t$  非常小,情况就会完全不同。 $P_{2 \rightarrow 1}$  不再与  $t$  成正比,而与  $t^2$  成正比:

$$P_{2 \rightarrow 1} \propto \alpha t^2 \quad (4.10.4)$$

对此作如下解释。在任何标准量子力学教科书中可以在跃迁理论中找到跃迁概率的公式

$$P_{2 \rightarrow 1} \propto \frac{\sin^2(\omega t/2)}{\omega^2},$$

此处  $\omega$  是跃迁的角频率。作为  $\omega$  的函数, 这个表达式表示一个尖峰图,

高度为  $t^2/4$ , 宽度为  $4\pi/t$ 。这个宽度是符合时间与能量间的不确定关系的。对  $\omega$  的积分给出峰下面的面积与  $t$  成正比, 因而概率  $P_{2 \rightarrow 1}$  与  $t$  成正比, 这就产生了有限的单位时间跃迁概率和费米的黄金规则。而对于非常小的  $t$ , 图像就完全不同了, 会出现一系列既低又宽的鼓包。在此情况下就不能只对中央的峰积分, 而需要对所有的  $\omega$  积分。结果是  $\frac{1}{4}t^2 \int \rho(\omega) d\omega$ ,

$$P_{2 \rightarrow 1} \text{ 就和 } t^2 \text{ 成正比。在这种情况下, 原子在两次测量后仍处于激发态的概率为}$$

$$(1 - \alpha t^2)^2 \approx 1 - 2\alpha t^2 \quad (4.10.5)$$

而如果不进行第一次测量, 这个概率是

$$1 - \alpha (2t)^2 \approx 1 - 4\alpha t^2 \quad (4.10.6)$$

显然, 在属于“与二次方成正比”的短时间所进行的测量减慢了跃迁过程。实际上, 在时间 0 和  $T$  之间进行等间隔的  $n$  (一个大数) 次测量, 而  $T/n$  在“与二次方成正比”的区域内, 原子仍处于激发态的概率是

$$\left(1 - \alpha \left(\frac{T}{n}\right)^2\right)^n = \left(1 - \alpha \frac{T^2}{n} \frac{1}{n}\right)^n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} e^{-\alpha T^2/n} \quad (4.10.7)$$

它在  $n \rightarrow \infty$  时趋于 1, 表示一个连续被监测的激发原子根本不会衰变。对于原子的自发辐射而言, 确定它的寿命和测量次数的关系极其困难, 但对受激跃迁却是可以实现的。D. J. Wineland 等人<sup>[47]</sup> 实现了 R. J. Cook 原先的建议, 用单一的俘获离子测量了这个依赖关系。图 4.35 给出了能级示意图。能级 2 与能级 1 用共振射频微扰相耦合形成相干叠加态。测量由调谐到能级 1~能级 3 共振的连续染料激光器进行。原则上只要观察到散射光子就能确认离子处于能级 1 之上。假设离子在  $\tau=0$  时处于能级 1 之上, 且对它施加共振射频的  $\pi$  脉冲(时间间隔  $T=\pi/\Omega$ , 此处  $\Omega$  是拉比频率)。当没有测量的激光脉冲时, 在时间  $\tau=T$ , 离子位于能级 2 的概率  $P_2(T)$  是 1。设测量脉冲在时间  $\tau=kT/n=k\pi/(n\Omega)$  时使用, 此处  $k=1, 2, \dots, n$ 。用二能级系统的矢量表示<sup>[48]</sup>, 得到  $P_2(T)$  的表达式<sup>[47]</sup>

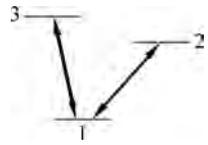


图 4.35 能级示意图

$$P_2(T) \approx \frac{1}{2} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{\pi^2}{n}\right) \right] \quad (4.10.8)$$

因此在  $n \rightarrow \infty$  时,  $P_2(T)$  趋于 0。图 4.36 与图 4.37 是<sup>[47]</sup> 用  $^9\text{Be}^+$  离子得出的作为测量脉冲数目  $n$  函数  $1 \rightarrow 2$  和  $2 \rightarrow 1$  跃迁概率的实验值和计算值。可以看到实验和理论结果符合得很好。

L. E. Ballentine<sup>[49]</sup> 的一段评论显示出量子力学的一个不寻常的情况。对于实验的推论, 大家的看法都是一致的, 但对于理论诠释却有着无休止的争论。Ballentine 认为波函数塌缩的概念在他对量子力学的“统计诠释”<sup>[50]</sup> 中不是必需的。他用自己的诠释把观测到的效应归结于测量脉冲对离子的强扰动。文献<sup>[47]</sup> 的作者在评论的回答<sup>[51]</sup> 中说, 量子力学有不同的诠释, 在当前问题中, 用或不用波函数塌缩的概念都能得到同样正确的结果。这样看来文献<sup>[47]</sup> 虽然没有否定波函数塌缩的概念, 但也不能作为它成立的肯定验证。

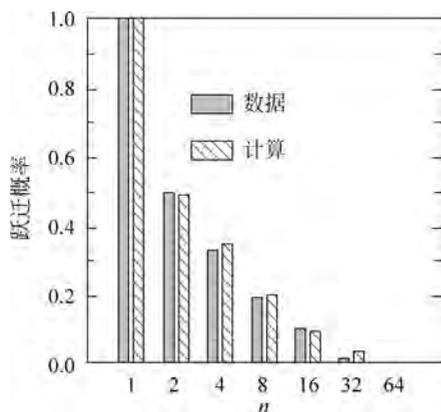


图 4.36 作为测量脉冲数目函数的  
1→2 跃迁概率  
取自文献[47]

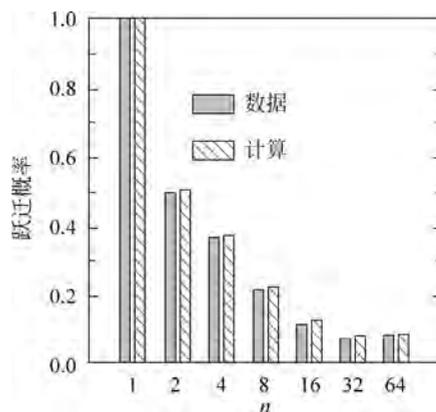


图 4.37 作为测量脉冲数目函数的  
2→1 跃迁概率  
取自文献[47]

## 4.11 压缩算符和压缩相干态

考虑角频率为  $\omega$  的量子化单模电场

$$\mathbf{E}(t) = E\hat{\epsilon}(ae^{i\omega t} + a^\dagger e^{-i\omega t}) \quad (4.11.1)$$

消灭算符  $a$  和产生算符  $a^\dagger$  满足对易关系

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad (4.11.2)$$

通过算符  $a$  和  $a^\dagger$  引入厄密算符  $X_1$  和  $X_2$ ：

$$X_1 = \frac{1}{2}(a + a^\dagger) \quad (4.11.3)$$

$$X_2 = \frac{1}{2i}(a - a^\dagger) \quad (4.11.4)$$

与质量为  $m$ 、角频率为  $\omega$  的量子力学谐振子问题相比,  $X_1$  和  $X_2$  正是无量纲的  $x$  和  $p$  算符：

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{a + a^\dagger}{\sqrt{2}} \quad (4.11.5)$$

$$p = \sqrt{m\hbar\omega} \frac{a - a^\dagger}{\sqrt{2}i} \quad (4.11.6)$$

算符  $X_1$  和  $X_2$  满足对易关系

$$[X_1, X_2] = \frac{i}{2} \quad (4.11.7)$$

通过算符  $X_1$  和  $X_2$ , 量子化电场可以表示为

$$\mathbf{E}(t) = E\hat{\epsilon}(X_1 \cos\omega t + X_2 \sin\omega t) \quad (4.11.8)$$

现在可以将  $X_1$  和  $X_2$  看作场的两个相位差为  $\pi/2$  的求积振幅(quadrature amplitude)。在复平面上复振幅  $X = X_1 + iX_2$  表示为一个点。对易关系式(4.11.7)导致不确定性关系

$$\Delta X_1 \Delta X_2 \geq \frac{1}{4} \quad (4.11.9)$$

考虑相干态  $|a\rangle$ 。在 4.1 节我们了解到相干态对于力学量  $x$  和  $p$  是最小不确定态。现在直接验证它对于  $X_1$  和  $X_2$  是最小不确定态:

$$\begin{aligned} (\Delta X_1)^2 &= \langle a | X_1^2 | a \rangle - \langle a | X_1 | a \rangle^2 \\ &= \frac{1}{4} \langle a | (a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + a^{\dagger 2}) | a \rangle - \frac{1}{4} [\langle a | (a + a^\dagger) | a \rangle]^2 \\ &= \frac{1}{4} \end{aligned} \quad (4.11.10)$$

此处我们运用了  $a|a\rangle = a|a\rangle$ 。类似地, 有  $(\Delta X_2)^2 = \frac{1}{4}$ , 因此得到

$$\Delta X_1 \Delta X_2 = \frac{1}{4} \quad (4.11.11)$$

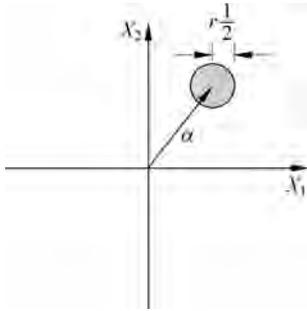


图 4.38 相干态  $|a, \xi\rangle$  的误差圆

不确定性乘积是最小的, 而且两个求积振幅的不确定性是平衡(相等)的:  $\Delta X_1 = \Delta X_2$ , 图 4.38 在复平面  $(X_1, X_2)$  上给出了相干态以及两个求积振幅的误差圆。

将复振幅  $X = X_1 + iX_2$  转动角度  $\theta/2$  来定义一组新的求积振幅:

$$Y_1 + iY_2 = (X_1 + iX_2)e^{-i\theta/2} \quad (4.11.12)$$

相应地, 定义么正压缩算符

$$S(\xi) = \exp\left(\frac{1}{2}\xi^* a^2 - \frac{1}{2}\xi a^{\dagger 2}\right) \quad (4.11.13)$$

此处

$$\xi = r e^{i\theta} \quad (4.11.14)$$

为一复数, 容易看出

$$S^\dagger(\xi) = S^{-1}(\xi) = S(-\xi) \quad (4.11.15)$$

从 Baker-Campbell-Hausdorff 公式

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \dots \quad (4.11.16)$$

可以得到

$$S^\dagger(\xi) a S(\xi) = a \cosh r - a e^{i\theta} \sinh r \quad (4.11.17)$$

$$S^\dagger(\xi) a^\dagger S(\xi) = a^\dagger \cosh r - a^\dagger e^{-i\theta} \sinh r \quad (4.11.18)$$

压缩相干态  $|a, \xi\rangle$  可以通过将压缩算符  $S(\xi)$  作用于相干态  $|a\rangle$  得到:

$$|a, \xi\rangle = S(\xi) |a\rangle \quad (4.11.19)$$

我们将看到相干态的两个转动后的求积振幅  $Y_1$  和  $Y_2$  的方差不相等(一个被压缩一个被延展)。通过式(4.11.12)、式(4.11.17)和式(4.11.18)可以决定压缩相干态  $|a, \xi\rangle$  对于新的一组  $Y_1$  和  $Y_2$  的方差, 从式(4.11.12)可以看出

$$Y_1 = \frac{a e^{-i\theta/2} + a^\dagger e^{i\theta/2}}{2} \quad (4.11.20)$$

$$Y_2 = \frac{a e^{-i\theta/2} - a^\dagger e^{i\theta/2}}{2i} \quad (4.11.21)$$

因此用式(4.11.17)和式(4.11.18)就得到

$$\begin{aligned} S^\dagger Y_1 S &= \frac{1}{2}(a e^{-i\theta/2} \cosh r - a^\dagger e^{i\theta/2} \sinh r + a^\dagger e^{i\theta/2} \cosh r - a e^{-i\theta/2} \sinh r) \\ &= \frac{1}{2}(a e^{-i\theta/2} + a^\dagger e^{i\theta/2}) e^{-r} \end{aligned} \quad (4.11.22)$$

用通过式(4.11.22)得到

$$\begin{aligned} (\Delta Y_1)^2 &= \langle a, \xi | Y_1^2 | a, \xi \rangle - \langle a, \xi | Y_1 | a, \xi \rangle^2 \\ &= \langle a | S^\dagger Y_1 S S^\dagger Y_1 S | a \rangle - \langle a | S^\dagger Y_1 S | a \rangle^2 \\ &= \frac{1}{4} e^{-2r} \end{aligned} \quad (4.11.23)$$

类似地有

$$(\Delta Y_2)^2 = \frac{1}{4} e^{2r} \quad (4.11.24)$$

以及

$$\Delta Y_1 \Delta Y_2 = \frac{1}{4} \quad (4.11.25)$$

我们看到两个求积振幅的方差不再相等,一个被压缩、另一个被延展,取决于  $r$  的值大于或小于 1。不确定乘积的值保持不变,在复振幅平面上  $|a, \xi\rangle$  的误差轮廓变为一个椭圆(图 4.39)它的面积与  $|a\rangle$  的误差圆相同。椭圆的主轴沿  $Y_1$  和  $Y_2$  方向,从  $X_1$  和  $X_2$  分别转动  $\theta/2$  角。

压缩态在最子光学和量子信息学方面有很多应用。

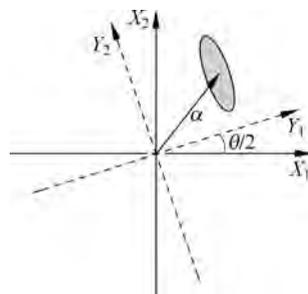


图 4.39 压缩相干态  $|a, \xi\rangle$  的误差椭圆

## 参考文献

- [1] SCHRÖDINGER E. Der stetige Übergang von der Mikro-zur Makromechanik[J]. Naturwissenschaften, 1926,14(28): 664-666.
- [2] KLAUDER J R, SKAGERSTAM B S. Coherent states: Applications in physics and mathematical physics[M]. Singapore: World Scientific,1985.
- [3] BROWN L S. Classical limit of the hydrogen atom[J]. American Journal of Physics, 1973, 41(4): 525-530.
- [4] PARKER J, STROUD C R. Coherence and decay of Rydberg wave packets[J]. Physical Review Letters, 1986,56: 716-719.
- [5] PAULI W. Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik [J]. Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 1926,36(5): 336-363.
- [6] FOCK V. Zur Theorie des Wasserstoffatoms[J]. Zeitschrift für Physik, 1935,98(3): 145-154.
- [7] BANDER M, ITZYKSON C. Group theory and the hydrogen atom ( I ) [J]. Reviews of Modern Physics, 1966,38: 330-345.
- [8] BANDER M, ITZYKSON C. Group theory and the hydrogen atom ( II ) [J]. Reviews of Modern Physics, 1966,38: 346-358.
- [9] NAUENBERG M. Quantum wave packets on kepler elliptic orbits[J]. Physical Review A, 1989, 40: 1133-1136.

- [10] BIALYNICKI-BIRULA I, KALIŃSKI M, EBERLY J H. Lagrange equilibrium points in celestial mechanics and nonspreading wave packets for strongly driven Rydberg electrons[J]. *Physical Review Letters*, 1994, 73: 1777-1780.
- [11] KALINSKI M, EBERLY J H, BIALYNICKI-BIRULA I. Numerical observation of stable field-supported rydberg wave packets[J]. *Physical Review A*, 1995, 52: 2460-2463.
- [12] KALINSKI M, EBERLY J H. Trojan wave packets: Mathieu theory and generation from circular states[J]. *Physical Review A*, 1996, 53: 1715-1724.
- [13] BETHE H A, SALPETER E E. *Quantum mechanics of one and two-electron atoms*[M]. Berlin: Springer-Verlag, 1957.
- [14] WEST J A, GAETA Z D, STROUD C R. Classical limit states of the helium atom[J]. *Physical Review A*, 1998, 58: 186-195.
- [15] KALINSKI M, EBERLY J H, West J A, et al. Rutherford atom in quantum theory[J]. *Physical Review A*, 2003, 67: 032503.
- [16] MAEDA H, GALLAGHER T F. Nondispersing wave packets[J]. *Physical Review Letters*, 2004, 92: 133004.
- [17] MAEDA H, NORUM D V L, GALLAGHER T F. Microwave manipulation of an atomic electron in a classical orbit[J]. *Science*, 2005, 307: 1757-1760.
- [18] GAETA Z D, STROUD C R. Classical and quantum-mechanical dynamics of a quasiclassical state of the hydrogen atom[J]. *Physical Review A*, 1990, 42: 6308-6313.
- [19] AVERBUKH I, PERELMAN N. Fractional revivals: Universality in the long-term evolution of quantum wave packets beyond the correspondence principle dynamics[J]. *Physics Letters A*, 1989, 139(9): 449-453.
- [20] YEAZELL J A, STROUD C R. Rydberg-atom wave packets localized in the angular variables[J]. *Physics Letters A*, 1987, 35: 2806-2809.
- [21] ALBER G, RITSCH H, ZOLLER P. Generation and detection of Rydberg wave packets by short laser pulses[J]. *Physics Letters A*, 1986, 34: 1058-1064.
- [22] ZUREK W H. Pointer basis of quantum apparatus: Into what mixture does the wave packet collapse? [J]. *Physical Review D*, 1981, 24: 1516-1525.
- [23] ZUREK W H. Environment-induced superselection rules [J]. *Physical Review D*, 1982, 26: 1862-1880.
- [24] ZUREK W H. Preferred States, predictability, classicality and the environment-induced decoherence [J]. *Progress of Theoretical Physics*, 1993, 89(2): 281-312.
- [25] ZUREK W H. Decoherence and the transition from quantum to classical[J]. *Physics Today*, 1991, 44: 36.
- [26] VON NEUMANN J. *Mathematical foundations of quantum mechanics*[M]. Princeton: Princeton University Press, 1995.
- [27] TORALDDIFRANCIA E B. *Problems in the foundations of physics*[M]. Amsterdam: North-Holland, 1979.
- [28] ZUREK W H, HABIB S, PAZ J P. Coherent states via decoherence[J]. *Physical Review Letters*, 1993, 70: 1187-1190.
- [29] CALDEIRA A, LEGGETT A. Quantum tunneling in a dissipative system[J]. *Annals of Physics*, 1983, 149(2): 374-456.
- [30] FEYNMAN R, VERNON F. The theory of a general quantum system interacting with a linear dissipative system[J]. *Annals of Physics*, 1963, 24: 118-173.
- [31] UNRUH W G, ZUREK W H. Reduction of a wave packet in quantum Brownian motion[J]. *Physics*

- Letters D,1989,40: 1071-1094.
- [32] WIGNER E. On the quantum correction for thermodynamic equilibrium[J]. *Physical Reviews*,1932, 40: 749-759.
- [33] WHEELER J A. The “past” and the “delayed-choice” double slit experiment[M]//Marlow A R. *Mathematical foundations of quantum theory*. New York: Academic Press,1978: 10-48.
- [34] BRAGINSKY V B, KHALILI F Y, THORNE K S. *Quantum measurement [M]*. Cambridge University Press,1992.
- [35] NAMIKI M, PASCAZIO S. Quantum theory of measurement based on the many-hilbert-space approach[J]. *Physics Reports*,1993,232(6): 301-411.
- [36] ANDERSON J L, GHIRARDI G, GRASSI R, et al. Negotiating the tricky border between quantum and classical[J]. *Physics Today*,1993,46: 13-15,81-90.
- [37] MONROE C, MEEKHOF D M, KING B E, et al. A “Schrödinger cat” superposition state of an atom [J]. *Science*,1996,272(1131-1136).
- [38] MONROE C, MEEKHOF D M, KING B E, et al. Resolved-sideband raman cooling of a bound atom to the 3d zero-point energy[J]. *Physical Review Letters*,1995,75: 4011-4014.
- [39] MEEKHOF D M, MONROE C, KING B E, et al. Generation of nonclassical motional states of a trapped atom[J]. *Physical Review Letters*,1996,76: 1796-1799.
- [40] MYATT C J, KING B E, TURCHETTE Q A, et al. Decoherence of quantum superpositions through coupling to engineered reservoirs[J]. *Nature*,2000,403(6767): 269-273.
- [41] BRUNE M, HAGLEY E, DREYER J, et al. Observing the progressive decoherence of the “meter” in a quantum measurement[J]. *Physical Review Letters*,1996,77: 4887-4890.
- [42] HAROCHE S. Entanglement, decoherence and the quantum/classical boundary[J]. *Physics Today*, 1998,51: 36.
- [43] FRIEDMAN J R, PATEL V, CHEN W, et al. Quantum superposition of distinct macroscopic states [J]. *Nature*,2000,406(6791): 43-46.
- [44] HACKERMÜLLER L, HORNBERGER K, BREZGER B, et al. Decoherence of matter waves by thermal emission of radiation[J]. *Nature*,2004,427(6976): 711-714.
- [45] JOOS E, ZEH H D. The emergence of classical properties through interaction with the environment [J]. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*,1985,59: 223.
- [46] MISRA B, SUDARSHAN E C G. The Zeno’s paradox in quantum theory[J]. *Journal of Mathematical Physics*,1977,18(4): 756-763.
- [47] YANG X, BURGDÖRFER J. Parametric correlations and diffusion in quantum spectra[J]. *Physical Review A*,1992,46: 2295-2303.
- [48] RABI I I, RAMSEY N F, SCHWINGER J. Use of rotating coordinates in magnetic resonance problems[J]. *Review of Modern Physics*,1954,26: 167-171.
- [49] BALLENTINE L E. Comment on quantum Zeno effect[J]. *Physical Review A*,1991,43: 5165-5167.
- [50] BALLENTINE L E. The statistical interpretation of quantum mechanics[J]. *Review of Modern Physics*,1970,42: 358-381.
- [51] ITANO W M, HEINZEN D J, BOLLINGER J J, et al. Reply to comment on quantum Zeno effect [J]. *Physical Review A*,1991,43: 5168-5169.

## 第 5 章 路径积分方法, 衰变态的瞬子方法

在普林斯顿大学惠勒教授的指导下进行博士学位论文研究时, 费曼尝试选用去掉场的概念而只考虑带电粒子及其推迟相互作用以摆脱量子电动力学中的无限大电子自能困难。在最初的本意上他没有成功, 却创造了与薛定谔、海森堡和狄拉克方法并列的一种表述量子力学的等价方法——路径积分方法。一个理论的各种等价表述在处理特定问题时是不同的。基于路径积分的瞬子方法在处理势垒隧穿以及衰变态问题上是十分有效的。第 6 章中的宏观量子现象和 7.6 节的非阿贝尔规范场的  $\Theta$  真空都是用这个方法处理的。在非阿贝尔规范场的量子化问题上, 路径积分提供了理想的框架(Faddeev 和 Popov)。一种处理耗散系统量子力学的方法也是基于路径积分方法的(6.5 节)。本章致力于介绍这种路径积分方法。

### 5.1 量子力学中的路径积分方法

路径积分是费曼<sup>[1-2]</sup>创立的一种量子力学的表述方法。它不以希尔伯特空间的态矢量和物理量作为算符的概念, 而将量子力学基本量的跃迁幅作为“对历史求和”的积分表示, 称为“路径积分”。在路径积分中所有的量都是  $c$  数。对一个量子体系的所有物理信息都能从路径积分中得到。在这个表述方法中, 经典力学的作用泛函起着重要作用。路径积分和统计物理中的配分函数有直接联系, 因此这个方法在统计力学中也有许多应用<sup>[3]</sup>可以直接推广到量子场论。在规范场的量子化中, 路径积分方法的应用使量子化的过程变得直接明确, 有力地推动了理论的发展。路径积分方法已应用到物理学许多分支的研究工作中, 有许多这方面的专著已经出版<sup>[4-5]</sup>。

令  $|q\rangle$  为坐标算符  $\hat{Q}$  的本征态(薛定谔绘景),  $|qt\rangle$  为海森堡绘景的相应状态, 相应地在时间  $t$  与  $t'$  间始末态交叠的跃迁幅是

$$\langle q't' | qt \rangle = \langle q' | \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t) \right] | q \rangle \quad (5.1.1)$$

将时间间隔  $t' - t$  分为  $n$  个等分  $\delta t = \frac{t' - t}{n}$ , 跃迁幅可以写作

$$\langle q' | \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t) \right] | q \rangle = \int dq_1 \cdots dq_{n-1} \langle q' | \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t \right) | q_{n-1} \rangle$$

$$\langle q_{n-1} | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t\right) | q_{n-2} \rangle \cdots \langle q_1 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t\right) | q \rangle \quad (5.1.2)$$

以上插入了  $n-1$  个态的完备集:  $1 = \int dq |q\rangle \langle q|$ 。下面将式(5.1.2)中的一个矩阵元进行变换:

$$\langle q_2 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t\right) | q_1 \rangle = \langle q_2 | \left(1 - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t\right) | q_1 \rangle + O(\delta t^2) \quad (5.1.3)$$

哈密顿量算符的形式为

$$\hat{H}(\hat{P}, \hat{Q}) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{Q})$$

它的矩阵元是

$$\begin{aligned} \langle q_2 | \hat{H}(\hat{P}, \hat{Q}) | q_1 \rangle &= \langle q_2 | \left[ \frac{\hat{P}^2}{2m} + V\left(\frac{q_2 + q_1}{2}\right) \right] \delta(q_2 - q_1) \\ &= \int \frac{dp}{2\pi} \langle q_2 | p \rangle \langle p | \frac{\hat{P}^2}{2m} | q_1 \rangle + V\left(\frac{q_2 + q_1}{2}\right) \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(q_2 - q_1)} \\ &= \int \frac{dp}{2\pi} e^{ip(q_2 - q_1)} \left[ \frac{p^2}{2m} + V\left(\frac{q_2 + q_1}{2}\right) \right] \end{aligned}$$

以上使用了  $1 = \int \frac{dp}{2\pi} |p\rangle \langle p|$ ,  $|p\rangle$  的归一化形式是  $\langle q | p \rangle = \exp\left(i \frac{p}{\hbar} q\right)$ , 它是算符  $\hat{P}$  本征态的本征值  $p$ 。  $V$  写成了对称化的形式。矩阵元式(5.1.3)已求值完毕:

$$\begin{aligned} \langle q_2 | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \delta t\right) | q_1 \rangle &\approx \int \frac{dp}{2\pi} \exp\left[i \frac{p}{\hbar} (q_2 - q_1)\right] \left\{ 1 - \frac{i}{\hbar} \delta t \left[ \frac{p^2}{2m} + V\left(\frac{q_2 + q_1}{2}\right) \right] \right\} \\ &\approx \int \frac{dp}{2\pi} \exp\left[i \frac{p}{\hbar} (q_2 - q_1)\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H\left(p, \frac{q_2 + q_1}{2}\right) \delta t\right] \end{aligned} \quad (5.1.4)$$

在式(5.1.4)的结果中,  $H$  已是常数函数了。跃迁幅式(5.1.2)变为

$$\begin{aligned} \langle q' | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t)\right] | q \rangle &= \int \frac{dp_1}{2\pi} \cdots \frac{dp_n}{2\pi} \int dq_1 \cdots dq_{n-1} \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^n \delta t \cdot \right. \\ &\quad \left. \left[ p_i \left( \frac{q_i - q_{i-1}}{\delta t} \right) - H\left(p_i, \frac{q_i + q_{i-1}}{2}\right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.1.5)$$

在式(5.1.2)中有  $n$  个因子, 故有  $n$  个积分变量  $p$ , 而在间隔中插入了  $n-1$  个完备集, 故有  $n-1$  个积分变量  $q$ 。式(5.1.5)可以在形式上写成(取  $n \rightarrow \infty$ )

$$\langle q' | \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t)\right] | q \rangle = \int \left[ \frac{dq dp}{2\pi} \right] \exp\left\{ \frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} dt [p \dot{q} - H(p, q)] \right\} \quad (5.1.6)$$

在式(5.1.5)的积分中, 对  $p_i$  的部分可以利用高斯积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} e^{-ax^2 + bx} = \frac{1}{\sqrt{4\pi a}} e^{b^2/4a}$$

求出

$$\int \frac{dp_i}{2\pi} \exp\left[-\frac{i}{2m} \delta t p_i^2 + i \frac{p_i}{\hbar} (q_i - q_{i-1})\right] = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \delta t}\right)^{1/2} \exp\left[\frac{im(q_i - q_{i-1})^2}{2 \hbar \delta t}\right]$$

此处将积分公式中的系数作为虚数使用, 可以理解为对虚时间作解析延拓。上式的指数因子和余下的因子重新合并为

$$\frac{i}{\hbar} \delta t \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{q_i - q_{i-1}}{\delta t} \right)^2 - V \left( \frac{q_i + q_{i-1}}{2} \right) \right]$$

式(5.1.5)就可以写作

$$\begin{aligned} & \langle q' | \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t' - t) \right] | q \rangle \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \delta t} \right)^{\frac{n}{2}} \int \prod_i^{n-1} dq_i \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^n \delta t \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{q_i - q_{i-1}}{\delta t} \right)^2 - V(q_i) \right] \right\} \\ &= N \int [Dq] \exp \left( \frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} d\tau \left[ \frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \right] \right) \\ &= N \int [Dq] \exp \left[ \frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} d\tau L(q, \dot{q}) \right] \\ &= N \int [Dq] \exp \left( \frac{i}{\hbar} S \right) \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

在式(5.1.7)中, 归一化常数  $N$  和测度  $[Dq]$  的乘积的定义包含在第一个等号右侧的极限中。这实际上是一个无穷维积分。 $L(q, \dot{q})$  是轨道  $q(t)$  的拉格朗日量,  $S$  是轨道的作用量, 定义都包含在式中。跃迁幅的诠释是: 它是从  $(q, t)$  到  $(q', t')$  的不同“历史”(所有可能的轨道)的和(图 5.1)。求和的权重是个相因子, 相位是  $S/\hbar$ ,  $S$  也就是这个“历史”的作用量。每一个积分变量  $q_i$  是在时间  $t_i$  的粒子可能坐标, 即对应不同历史在  $t_i$  时的  $q$  值(图中  $t_i$  处的直线与不同轨道的交点)。从式(5.1.7)可以看出, 路径积分的表达方式与经典力学间的对应是明显的。在很多可能的历史中, 有一个历史是特殊的, 它就是使作用量取极值的经典轨道。和经典力学不同的是, 其他轨道也可能有自己的权重函数(相因子)共同参与在求和中。这些都在以下的发展和例子中得到阐明。

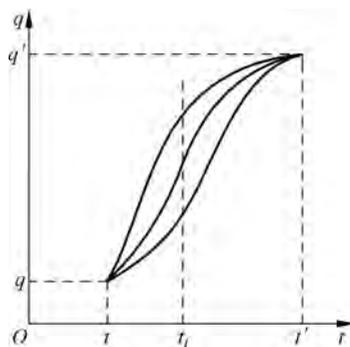


图 5.1 从  $(q, t)$  到  $(q', t')$  的不同历史

求解能量本征函数及本征值问题在路径积分中如何表现呢? 记  $\hat{H}$  的本征态为  $|n\rangle$ , 对应的本征值为  $E_n$ , 即有

$$\hat{H} |n\rangle = E_n |n\rangle \quad (5.1.8)$$

跃迁幅  $\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle$  是

$$\langle x_f t_f | x_i t_i \rangle = \sum_n \exp \left( -i \frac{E_n}{\hbar} t \right) \langle x_f | n \rangle \langle n | x_i \rangle \quad (5.1.9)$$

此处  $t = t_f - t_i$ 。当对具体问题求出跃迁幅的路径积分后, 通过和式(5.1.9)右侧相比就能得到  $E_n$  和  $\phi_n = \langle x | n \rangle$ 。在下面的谐振子举例中, 将给出这个计算的概要。如果只求最低态, 则可过渡到虚时间

$$t \equiv -i\tau \quad (5.1.10)$$

此时跃迁幅变为

$$\langle x_f | \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) | x_i \rangle = \sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{\hbar}\tau\right) \langle x_f | n \rangle \langle n | x_i \rangle \quad (5.1.11)$$

计算出路径积分后,可将结果用  $\tau$  展开,将展开式和式(5.1.11)右侧比较,就能得到低能量本征值和相应的本征函数。

现在讨论路径积分的计算。考虑质量  $m=1$  的粒子,其拉格朗日量是

$$L = \frac{1}{2} \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 - V(x) \quad (5.1.12)$$

其作用量是

$$S = \int_{t_i}^{t_f} L\left(x, \frac{dx}{dt}\right) dt \quad (5.1.13)$$

在欧氏时空中( $x, \tau=it$ ),路径积分中的相因子是

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}S[x(t)]\right) = \exp\left\{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + V(x)\right] d\tau\right\} \equiv \exp\left(-\frac{1}{\hbar}S_E\right) \quad (5.1.14)$$

此处欧氏作用量  $S_E$  是

$$S_E = \int_{\tau_i}^{\tau_f} \left[\frac{1}{2}\dot{x}^2 + V(x)\right] dx \quad (5.1.15)$$

$\dot{x}$  是  $dx/d\tau$  的缩写。在以下的讨论中略去下标 E。要计算的跃迁幅是

$$\langle x_f | \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) | x_i \rangle = N \int [Dx] e^{-S/\hbar} \quad (5.1.16)$$

作用量的始末态坐标为

$$x_i = x(\tau_i), \quad x_f = x(\tau_f) \quad (5.1.17)$$

对路径积分式(5.1.16)的主要贡献来自给出最小作用量  $S_0$  的轨道,即经典轨道,记为  $X(\tau)$ 。远离经典轨道的轨道对路径积分贡献很小,可以略去。记其他满足条件式(5.1.17)的可能的邻近轨道为  $x(\tau)$ ,将  $x(\tau)$  用经典轨道  $X(\tau)$  和对它的偏离  $\delta x(\tau)$  表示:

$$x(\tau) = X(\tau) + \delta x(\tau) \quad (5.1.18)$$

将  $\delta x(\tau)$  用一正交归一完备集  $x_n(\tau)$  展开,式(5.1.18)可以写作

$$x(\tau) = X(\tau) + \sum_n c_n x_n(\tau) \quad (5.1.19)$$

$[Dx]$  可以写为

$$[Dx] = \prod_n \frac{dc_n}{\sqrt{2\pi\hbar}} \quad (5.1.20)$$

数值因子直到归一因子取确定值以前都没有特殊意义。下面要证明的是路径积分式(5.1.16)和  $e^{-S_0/\hbar}$  成正比,此处  $S_0$  就是经典轨道的作用量,称比例因子为“前置因子”(prefactor),由偏离经典轨道的所有轨道贡献。将任意轨道的作用量泛函  $S[x(\tau)]$  用经典作用量  $S_0$  和各阶变分表示:

$$\begin{aligned} S[x(\tau)] &= \int_{\tau_i}^{\tau_f} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 + V(x)\right] d\tau \\ &= S[X(\tau) + \delta x(\tau)] = S[X(\tau)] + \delta S + \delta^2 S + \dots \end{aligned} \quad (5.1.21)$$

$S[X(\tau)]$  就是经典作用量  $S_0$ 。 $S[x(\tau)] - S[X(\tau)]$  取到  $\delta x$  一阶就是  $\delta S$ ,取到二阶量就是

$\delta^2 S$  等。考虑到关系:

$$V(x) - V(X) = V'(X)\delta x + \frac{1}{2}V''(X)(\delta x)^2,$$

$$\left(\frac{dX}{d\tau} + \frac{d}{d\tau}\delta x\right)^2 - \left(\frac{dX}{d\tau}\right)^2 = 2\frac{dX}{d\tau}\frac{d}{d\tau}\delta x + \left(\frac{d}{d\tau}\delta x\right)^2$$

以及上式右侧在积分  $\int d\tau$  下作分部积分, 并用边界条件  $\delta x(\tau_f) = \delta x(\tau_i) = 0$ , 有

$$2\frac{dX}{d\tau}\frac{d}{d\tau}\delta x \rightarrow -2\frac{d^2 X}{d\tau^2}\delta x,$$

$$\left(\frac{d}{d\tau}\delta x\right)^2 \rightarrow -\left(\frac{d^2}{d\tau^2}\delta x\right)\delta x \text{ ①}$$

最后得

$$\delta S = \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau \left[ -\frac{d^2 X}{d\tau^2} + V'(X) \right] \delta x \quad (5.1.22)$$

最小作用的要求由  $\delta S = 0$  给出

$$-\frac{d^2 X}{d\tau^2} + V'(X) = 0 \quad (5.1.23)$$

这就是作用量(式(5.1.21))为极值的欧拉-拉格朗日方程(Euler-Lagrange equation), 即经典轨道满足的方程。由于  $\delta S = 0$ , 有

$$S = S_0 + \delta^2 S \quad (5.1.24)$$

$$\delta^2 S = \int_{\tau_i}^{\tau_f} \left[ -\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\tau^2}\delta x + \frac{1}{2}V''(X)\delta x \right] \delta x d\tau \quad (5.1.25)$$

$\delta^2 S$  是由偏离经典轨道给出的贡献。为了求出  $\delta^2 S$ , 需要对式(5.1.19)中的  $x_n$  给以具体规定。令它的本征方程为

$$\left[ -\frac{d^2}{d\tau^2} + V''(X) \right] x_n = \lambda_n x_n \quad (5.1.26)$$

边界条件为

$$x_n(\tau_i) = x_n(\tau_f) = 0$$

正交归一化条件是

$$\int_{\tau_i}^{\tau_f} x_m(\tau)x_n(\tau)d\tau = \delta_{mn}$$

将  $\delta x = \sum c_n x_n$  代入式(5.1.25)并用正交归一条件和式(5.1.26), 得

$$\begin{aligned} \delta^2 S &= \int d\tau \sum_{m,n} c_m c_n \left[ -\frac{1}{2}\frac{d^2}{d\tau^2} + \frac{1}{2}V''(X) \right] c_n x_n \\ &= \sum_{mn} \frac{1}{2}\lambda_n c_m c_n \delta_{mn} = \frac{1}{2}\sum_n c_n^2 \lambda_n \end{aligned} \quad (5.1.27)$$

路径积分式(5.1.16)已经算出:

$$\langle x_f \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) \right| x_i \rangle = N \int [Dx] e^{-S/\hbar} = N e^{-S_0/\hbar} \int \prod_n \frac{dc_n}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\delta^2 S/\hbar}$$

① 这一项对  $\delta^2 S$  有贡献。

$$\begin{aligned}
&= N e^{-S_0/\hbar} \int \prod_n \frac{dc_n}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{1}{2\hbar} \sum_n c_n^2 \lambda_n\right) \\
&= N \left(\prod_n \lambda_n^{-\frac{1}{2}}\right) e^{-S_0/\hbar} \quad (5.1.28)
\end{aligned}$$

上面最后一步用了高斯积分公式。由于  $\lambda_n$  正是算符  $-\frac{d^2}{d\tau^2} + V''(X)$  的本征值, 因此有

$$\prod_n \lambda_n^{-\frac{1}{2}} = [\det(-\partial_\tau^2 + V''(X))]^{-1/2} \quad (5.1.29)$$

式(5.1.28)可改写为

$$\langle x_f | \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) | x_i \rangle = N [\det(-\partial_\tau^2 + V''(X))]^{-1/2} e^{-S_0/\hbar} \quad (5.1.30)$$

这是准到二阶变分的结果。更高阶的结果给出了  $O(\hbar)$  的修正, 即

$$\langle x_f | \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) | x_i \rangle = N [\det(-\partial_\tau^2 + V''(X))]^{-1/2} e^{-S_0/\hbar} (1 + O(\hbar))$$

作为简单的例子, 考虑抛物线势(图 5.2)。选择边界条件  $x_i = x_f = 0$ 。因此经典轨道是  $X(\tau) = 0$ , 经典作用量是  $S_0 = 0$ 。记  $V''(X(\tau)) = V''(X=0) = \omega^2$ , 有

$$\begin{aligned}
&\langle x_f | \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) | x_i \rangle \\
&= N [\det(-\partial_\tau^2 + \omega^2)]^{-1/2} e^{-S_0/\hbar} (1 + O(\hbar))
\end{aligned}$$

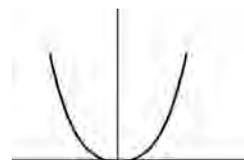


图 5.2 抛物线势

以下将要证明, 当  $\tau_i = -\tau_0/2, \tau_f = \tau_0/2$  以及  $\tau$  值很大时, 有

$$\langle 0 | \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau\right) | 0 \rangle = N [\det(-\partial_\tau^2 + \omega^2)]^{-1/2} = \left(\frac{\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2} \quad (5.1.31)$$

将式(5.1.31)和式(5.1.11)右侧相比较, 就得到基态  $|0\rangle$  的本征值和零点波函数:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega (1 + O(\hbar)),$$

$$\langle x=0 | 0 \rangle = \left(\frac{\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2} (1 + O(\hbar))$$

下面根据文献[6]的附录给出式(5.1.31)的证明。考虑微分方程:

$$(-\partial_\tau^2 + W(\tau))\psi = \mu\psi \quad (5.1.32)$$

此处  $W(\tau)$  是  $\tau$  的有界函数,  $\mu$  是参数。令  $\psi_\mu(\tau)$  为式(5.1.32)的解, 且满足边界条件<sup>①</sup>

$$\psi_\mu(-\tau_0/2) = 0, \quad \partial_\tau \psi_\mu(-\tau_0/2) = 1 \quad (5.1.33)$$

算符  $(-\partial_\tau^2 + W(\tau))$  的本征值为  $\lambda_n$ , 它对应的本征函数满足边界条件

$$\psi_{\lambda_n}\left(-\frac{\tau_0}{2}\right) = \psi_{\lambda_n}\left(\frac{\tau_0}{2}\right) = 0$$

可改写式(5.1.29)为

<sup>①</sup> 注意这是和式(5.1.26)不同的问题。由于边界条件不同, 它对任意  $\mu$  参数的值都有解, 而式(5.1.26)仅对本征值  $\lambda_n$  有解。

$$\det(-\partial_\tau^2 + W(\tau)) = \prod_n \lambda_n \quad (5.1.34)$$

令  $W^{(1)}$  和  $W^{(2)}$  为两个不同的  $\tau$  的函数, 并令  $\psi_\mu^{(1)}$  和  $\psi_\mu^{(2)}$  为式(5.1.32)相应的解。考虑以下表达式:

$$\frac{\det(-\partial_\tau^2 + W^{(1)} - \mu)}{\det(-\partial_\tau^2 + W^{(2)} - \mu)} = \frac{\psi_\mu^{(1)}(\tau_0/2)}{\psi_\mu^{(2)}(\tau_0/2)} \quad (5.1.35)$$

上式等号左侧是复变量  $\mu$  的半纯函数<sup>①</sup>, 在每一个  $\mu = \lambda_n^{(1)}$  处有一个单纯的 0, 在每一个  $\mu = \lambda_n^{(2)}$  处有一个单纯的极点, 这些  $\lambda$  都是正实数。除在正实轴上以外, 函数是到处解析的。在复平面任何方向(正实轴除外)取极限  $\mu \rightarrow \infty$ , 函数趋于极限 1。对于一个在一定区域内的解析函数, 若它的值(沿一个在此区域内的连续曲线上)是一个常数, 则它在整个区域内的值就等于这个常数。因此上式的右侧除在正实轴上以外都等于 1。定义  $N$ :

$$\frac{\det(-\partial_\tau^2 + W)}{\psi_0(\tau_0/2)} = \pi \hbar N^2 \quad (5.1.36)$$

因为对于  $\mu = 0$ , 上式的左侧(根据式(5.1.35))与  $W$  无关,  $N$  一定是个常数。因此有:

$$N [\det(-\partial_\tau^2 + W^{(1)})]^{-1/2} = [\pi \hbar \psi_0(\tau_0/2)]^{-1/2} \quad (5.1.37)$$

这个关系对于任何有界的函数  $W(\tau)$  和相应的解  $\Psi_\mu$  在  $\mu = 0$  时都适用。

回到谐振子问题,  $W = \omega^2$  是常数, 满足式(5.1.32)和式(5.1.33)的解  $\psi_0$  是

$$\psi_0(\tau) = \frac{1}{\omega} \sinh \omega \left( \tau + \frac{\tau_0}{2} \right) \quad (5.1.38)$$

现在  $\psi_0\left(\frac{\tau_0}{2}\right) = \frac{1}{\omega} \sinh \omega \frac{\tau_0}{2}$ , 对于谐振子式(5.1.37)就是

$$N [\det(-\partial_\tau^2 + \omega^2)]^{-1/2} = \left( \frac{\omega}{\hbar \pi} \right)^{1/2} e^{-\omega \tau_0/2}$$

式(5.1.31)得证。前置因子的另一种算法见附录 3。

闵可夫斯基时空(Minkowski space)按照普遍的跃迁幅计算的概要<sup>②</sup>计算的路径积分是

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle = \int [Dx] \exp\left(\frac{i}{\hbar} S\right) \equiv \exp\left(\frac{i}{\hbar} S_0\right) F_\omega(t_b - t_a) \quad (5.1.39)$$

式中

$$S = \int_{t_a}^{t_b} \frac{m}{2} (\dot{x}^2 - \omega^2 x^2) dt \quad (5.1.40)$$

经典轨道方程是

$$\ddot{x} = -\omega^2 x \quad (5.1.41)$$

满足边界条件的解是

$$X(t) = \frac{x_b \sin \omega(t - t_a) + x_a \sin \omega(t_b - t)}{\sin \omega(t_b - t_a)} \quad (5.1.42)$$

$S_0$  容易求得, 但  $F_\omega$  的计算比较复杂。结果是

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi i \hbar/m}} \sqrt{\frac{\omega}{\sin \omega(t_b - t_a)}}$$

① 当复变函数仅有极点作为奇点时, 称为“半纯函数”。

② 参阅文献[2] § 2.4, § 9.3。

$$\cdot \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \frac{m\omega}{2\sin\omega(t_b - t_a)} [(x_b^2 + x_a^2) \cos\omega(t_b - t_a) - 2x_b x_a]\right\} \quad (5.1.43)$$

路径积分可以用  $\hat{H}$  的本征函数来表示,其本征值为

$$\langle x_b t_b | x_a t_a \rangle = \sum_n \psi_n(x_b) \psi_n^*(x_a) e^{-iE_n(t_b - t_a)/\hbar} \quad (5.1.44)$$

将它与式(5.1.43)比较就能得到本征函数和本征值。为此要用梅勒公式(Mehler's formula)<sup>①</sup>:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\sqrt{1-a^2}} \exp\left[-\frac{1}{1-a^2}(x^2 + x'^2 - 2xx'a)\right] \\ &= e^{-x^2 - x'^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{2^n n!} H_n(x) H_n(x') \end{aligned}$$

此处  $H_n(x)$  是埃尔米特多项式。令  $a = e^{-i\omega(t_b - t_a)}$ ,  $x = \frac{x_b}{\lambda}$ ,  $x' = \frac{x_a}{\lambda}$ ,  $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ , 用梅勒公式变换式(5.1.43), 并和式(5.1.44)比较, 得

$$\left. \begin{aligned} \psi_n(x) &= N_n \lambda^{-1/2} e^{-x^2/2\lambda^2} H_n(x/\lambda) \\ N_n &= (2^n n! \sqrt{\pi})^{-1/2} \\ E_n &= \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \end{aligned} \right\} \quad (5.1.45)$$

这和解薛定谔方程的结果完全一样。

## 5.2 瞬子与双阱中能级的相干劈裂

考虑图 5.3(a)所示的双势阱。势对坐标  $x$  是对称的, 即

$$V(-x) = V(x) \quad (5.2.1)$$

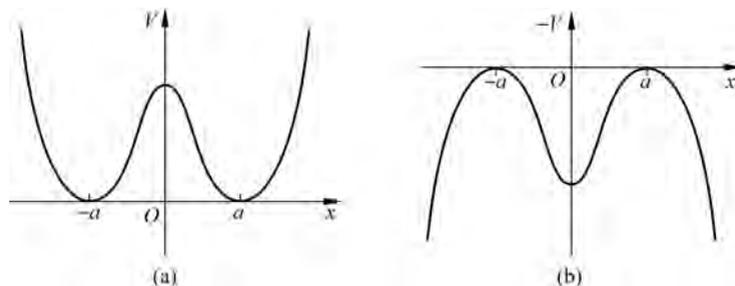


图 5.3 双势阱及其力学模拟  
(a) 双势阱; (b) 双势阱的力学模拟

抛物线在  $x = \pm a$  处为 0(极小值), 并有  $V''(\pm a) = \omega^2$ 。经典轨道的运动方程(欧氏时空)由式(5.2.1)给出:

$$\frac{d^2 X}{d\tau^2} = V'(X)$$

将它与闵可夫斯基时空的运动方程( $m=1$ )

<sup>①</sup> Morse P M, Feshbach H. Method of Theoretical Physics, Vol. I. New York: McGraw Hill, 1953: 781.

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -V'(x)$$

比较, 就可以把  $X$  在虚时间  $\tau$  的运动和一个经典粒子在势  $-V$  中的实时间运动相比拟 (图 5.2(b))。这样就可以利用经典力学的概念来定性地分析经典轨道。这种方法被称为“力学模拟”。从双阱势的力学模拟分析, 有两种简单的经典轨道: ① 对所有的  $\tau$  值,  $X(\tau) = -a$  或  $X(\tau) = a$ ; ②  $X(-\frac{\tau}{2}) = -a, X(\frac{\tau}{2}) = a, \tau \rightarrow \infty$  或  $X(-\frac{\tau}{2}) = a, X(\frac{\tau}{2}) = -a, \tau \rightarrow \infty$ 。在路径积分中要计算的跃迁幅是

$$\langle -a | \exp\left(-\frac{\hat{H}\tau}{\hbar}\right) | -a \rangle = \langle a | \exp\left(-\frac{\hat{H}\tau}{\hbar}\right) | a \rangle \quad (5.2.2)$$

和

$$\langle a | \exp\left(-\frac{\hat{H}\tau}{\hbar}\right) | -a \rangle = \langle -a | \exp\left(-\frac{\hat{H}\tau}{\hbar}\right) | a \rangle \quad (5.2.3)$$

考虑第二类解, 由于  $\tau \rightarrow \infty$ , 从力学模拟角度分析, 粒子在  $x = \pm a$  时的速度为 0, 因此势能和动能都为 0, 是零能量解:  $\frac{1}{2}\left(\frac{dx}{d\tau}\right)^2 - V = 0$ 。对于路径积分经典解, 这相当于

$$\frac{dX}{d\tau} = \sqrt{2V} \quad (5.2.4)$$

它的解是

$$\tau = \tau_c + \int_0^X dx' (2V(x'))^{-1/2} \quad (5.2.5)$$

$\tau_c$  是  $X=0$  对应的虚时间, 是个任意的积分常数。图 5.4 给出了式 (5.2.5), 它称为“以  $\tau_c$  为中心的瞬子”, 也称“扭折解”(kink)。瞬子 (instanton) 在数学结构上与场论中粒子状的解——“孤子”很类似, 所以称为“子”(on)。由于它在很长的(虚)时间都位于  $-a$  或  $+a$ , 只在一瞬间离开  $\pm a$  从  $X=0$  处掠过, 故名“瞬子”。这一“瞬”是可以估计的。在  $r \rightarrow \infty, X \approx a$  时,  $V$  可以写为  $\frac{1}{2}\omega^2(a-X)^2$ , 从式 (5.2.4) 得  $\frac{dX}{d\tau} \approx \omega(a-X)$ , 解为  $a-X = e^{-\omega\tau}$ 。因此, 只在  $1/\omega$  这一瞬间  $X$  才明显远离  $a$ 。 $X(-\infty) = a, X(+\infty) = -a$  的解称为“反瞬子”。从式 (5.2.4) 可以得出瞬子(反瞬子)的经典作用量

$$S_0 = \int d\tau \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{dX}{d\tau} \right)^2 + V \right] = \int d\tau \left( \frac{dx}{d\tau} \right)^2 = \int_{-a}^a dx \sqrt{2V} \quad (5.2.6)$$

由于在虚时间  $(-\infty, \infty)$ ,  $1/\omega$  是个可忽略的量(一瞬), 瞬子(反瞬子)并不是唯一的近似经典解。由一系列瞬子-反瞬子连接而成的也是近似经典解。图 5.5 给出了这个系列,  $\tau_1, \tau_2, \dots$  为各个瞬子(反瞬子)的中心。在图上  $1/\omega$  取为 0。对  $n$  个瞬子-反瞬子系列的经典作用量是  $nS_0$ , 因为根据式 (5.2.6), 瞬子的作用主要来自  $X \approx 0$  的那一瞬。路径积分前置因子  $[\det(-\partial_\tau^2 + V''(X))]^{-1/2}$  的计算涉及问题较多。如果没有  $\tau_1, \tau_2, \dots$  这些瞬间, 粒子就会位于  $+a$  或  $-a$ , 在那里  $V'' = \omega^2$ , 因此结果和谐振子(式 (5.1.31)) 一样, 即  $\left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2}$ 。

令单瞬子对前置因子的修正为因子  $K$  (下面计算), 则  $n$  个瞬子-反瞬子的前置因子应该是

$$\left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2} K^n \quad (5.2.7)$$

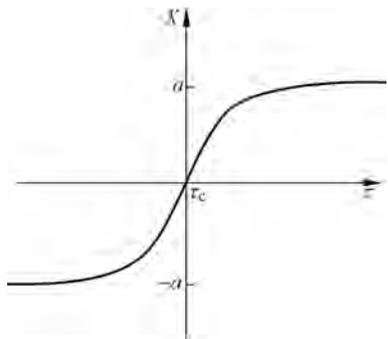


图 5.4 瞬子解

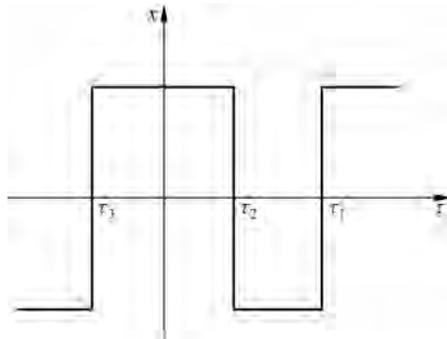


图 5.5 瞬子-反瞬子系列

由于  $\tau_1, \tau_2, \dots$  的位置是任意的, 对所有的经典轨道求和也涉及对这些位置的积分。由于被积分函数与  $\tau_1, \dots, \tau_2$  的位置无关, 因此有

$$\int_{-\tau_0/2}^{\tau_0/2} d\tau_1 \int_{-\tau_0/2}^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_{-\tau_0/2}^{\tau_{n-1}} d\tau_n = \frac{\tau_0^n}{n!} \quad (5.2.8)$$

还有一个细节是, 如果  $X\left(-\frac{\tau_0}{2}\right) = X\left(\frac{\tau_0}{2}\right)$ , 则应取偶数的瞬子-反瞬子; 如果  $X\left(-\frac{\tau_0}{2}\right) = -X\left(\frac{\tau_0}{2}\right)$ , 则应取奇数个瞬子-反瞬子。例如

$$\begin{aligned} \langle -a | \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right) | a \rangle &= \left(\frac{\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2} \sum_{n(\text{odd})} \frac{K^n e^{-nS_0/\hbar} \tau_0^n}{n!} \\ &= \left(\frac{\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2} \frac{1}{2} [\exp(K e^{-S_0/\hbar} \tau_0) - \\ &\quad \exp(-K e^{-S_0/\hbar} \tau_0)] \end{aligned} \quad (5.2.9)$$

$$\begin{aligned} \langle -a | \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right) | -a \rangle &= \left(\frac{\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2} \sum_{n(\text{even})} \frac{K^n e^{-nS_0/\hbar} \tau_0^n}{n!} \\ &= \left(\frac{\omega}{\pi \hbar}\right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2} \frac{1}{2} [\exp(K e^{-S_0/\hbar} \tau_0) + \\ &\quad \exp(-K e^{-S_0/\hbar} \tau_0)] \end{aligned} \quad (5.2.10)$$

和式(5.1.11)相比,  $\hat{H}$  的本征值是

$$E_{\pm} = \frac{1}{2} \hbar\omega \pm \hbar K e^{-S_0/\hbar} \quad (5.2.11)$$

相应的本征态  $|+\rangle$  和  $|-\rangle$  (激发态和基态) 与  $|a\rangle$  和  $|-a\rangle$  的内积为

$$\begin{aligned} |\langle + | \pm a \rangle|^2 &= |\langle - | \pm a \rangle|^2 = \langle a | -\rangle \langle - | -a \rangle = -\langle a | +\rangle \langle + | -a \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\omega}{\pi \hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (5.2.12)$$

基态  $|-\rangle$  是  $|a\rangle$  与  $|-a\rangle$  的偶组合, 激发态是它们的奇组合。以上的结果可以从

$$\langle + | \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right) | + \rangle = \exp\left(-\frac{E_+}{\hbar}\tau_0\right) = e^{-\omega_0\tau_0/2} \exp(-K e^{-S_0/\hbar} \tau_0) \quad (5.2.13)$$

$$\langle - | \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right) | - \rangle = \exp\left(-\frac{E_-}{\hbar}\tau_0\right) = e^{-\omega_0\tau_0/2} \exp(K e^{-S_0/\hbar}\tau_0) \quad (5.2.14)$$

两个要求得到。

上面实现的实际是二能级体系的相干劈裂。如果双阱中间的峰是无限高的, 则两个阱中的基态是分别简并的。但峰是有限的, 左右阱中的基态能通过隧穿而混合, 因而  $|+\rangle$  与  $|-\rangle$  就有能量差  $2\hbar K e^{-S_0/\hbar}$ 。隧穿因子  $e^{-S_0/\hbar}$  的出现是自然的。由于本征态是左右两阱基态的相干叠加, 那么称这个劈裂为“相干劈裂”。

以下计算单个瞬子的前置因子  $K$ 。令  $X(\tau, \tau_c)$  代表中心在  $\tau_c$  的瞬子解。将  $\tau_c$  移动小量  $\delta\tau_c$  后的解与原解之差为

$$X(\tau, \tau_c) - X(\tau, \tau_c + \delta\tau_c) = -\frac{\partial}{\partial\tau_c} X(\tau, \tau_c) \delta\tau_c = \frac{\partial}{\partial\tau} X(\tau, \tau_c) \delta\tau_c$$

上式最后一步是因为移动  $\tau_c$  和反方向移动  $\tau$  的原点等价。由于移动解并不变更作用量, 可以从式(5.1.25)得到

$$\left[-\frac{d^2}{d\tau^2} + V''(X)\right] \delta X = 0$$

即

$$\left[-\frac{d^2}{d\tau^2} + V''(X)\right] \frac{\partial}{\partial\tau} X(\tau, \tau_c) = 0 \quad (5.2.15)$$

从此得到结论,  $\frac{\partial X}{\partial\tau}$  是算符  $\left[-\frac{d^2}{d\tau^2} + V''(X)\right]$  的本征函数, 相应的本征值为 0, 称为“零模解”。

记  $x_0$  为归一的零模解<sup>①</sup>:

$$x_0 = C \frac{dX}{d\tau}$$

其归一条件是

$$1 = C^2 \int d\tau \left(\frac{dX}{d\tau}\right)^2 = C^2 S_0 \quad (5.2.16)$$

式(5.2.16)最后一步的根据是式(5.2.6)。因此有

$$x_0 = (S_0)^{-1/2} \frac{dX}{d\tau} \quad (5.2.17)$$

在将任意解  $x(\tau)$  在  $X(\tau)$  附近展开, 有

$$x(\tau) = X(\tau) + c_0 x_0 + \sum_{n=1} c_n x_n \quad (5.2.18)$$

对  $c_0$  积分, 会给出  $\lambda_0^{-1/2}$ , 而  $\lambda_0 = 0$ 。不过实际上对  $c_0$  的积分等价于对  $\tau_c$  的积分, 而对  $\tau_c$  的积分已经在上文对瞬子中心位置的积分式(5.2.8)做过了。现在只需找出等价的比例因子即可。当变化为  $d\tau_c$  时,  $x(\tau)$  的变化是

$$dx(\tau) = -\frac{dX}{d\tau} d\tau_c = -S_0^{1/2} x_0 d\tau_c$$

而变化  $c_0$  带来的是

① 以下不涉及  $\tau_c$  的变化,  $X$  只是  $\tau$  的函数。在讨论零模解时就用  $\frac{dX}{d\tau}$ 。

$$dx(\tau) = x_0 dc_0$$

二者相比给出

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} dc_0 = \sqrt{\frac{S_0}{2\pi\hbar}} d\tau_c \quad (5.2.19)$$

这样, 单子瞬子对路径积分的贡献已全部算出:

$$\langle a \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right) \right| -a \rangle_1 = N\tau_0 \left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-S_0/\hbar} \det' \left[ -\frac{\partial^2}{\partial\tau^2} + V''(X) \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (5.2.20)$$

det 上的撇号“'”代表不包括零本征值, 而对  $\frac{dc_0}{\sqrt{2\pi\hbar}}$  的积分已被  $\tau_0 \left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}$  取代了。将式(5.2.9)中一个瞬子的贡献抽出:

$$\langle a \left| \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar}\tau_0\right) \right| -a \rangle_1 = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\omega\tau_0/2} K e^{-S_0/\hbar} \tau_0$$

并考虑谐振子的前置因子(式(5.1.35)):

$$N \det \left[ -\frac{\partial^2}{\partial\tau^2} + \omega^2 \right]^{-1/2} = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\omega\tau_0/2}$$

就得出

$$K = \left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \left[ \frac{\det\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2} + \omega^2\right)}{\det'\left(-\frac{\partial^2}{\partial\tau^2} + V''(X)\right)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (5.2.21)$$

从量子力学的通常表述(用 WKB 法解薛定谔方程)得出的结果与以上  $K$  的计算是符合的, 可参阅文献[6]附录 B。但瞬子方法比 WKB 法更严密, 可以计算更高阶的近似。

上文提到, 路径积分的计算(指数上的经典作用量, 二级变分给出的前置因子)相当于半经典近似。式(5.2.11)中对能量  $\frac{1}{2}\hbar\omega$  的修正  $\hbar K e^{-S_0/\hbar}$  包含一个指数因子。半经典近似的结果只在  $O(\hbar)$  情况才有意义。当  $S_0 \gg \hbar$  时, 修正项会比  $O(\hbar^2)$  还小。保留它是否有意义呢? 作为修正项, 它没有意义, 但作为  $|+\rangle$  和  $|-\rangle$  的劈裂, 它是带头项, 因此是有意义的。

更多内容可参阅文献[6]。

### 5.3 密度矩阵与路径积分

考虑量子算符  $\hat{K}$ , 它的分立本征态  $\{|k_n\rangle\}$  组成了正交归一完备集。一个量子体系的波函数  $|\psi\rangle$  可以展开成这个集合的线性叠加:

$$|\psi\rangle = \sum c_n |k_n\rangle \quad (5.3.1)$$

展开系数  $c_n$  满足条件  $\sum |c_n|^2 = 1$ 。  $|c_n|^2$  是状态  $|\psi\rangle$  位于本征态  $|k_n\rangle$  的概率。叠加式(5.3.1)包含的信息比以上陈述更多, 因为复系数  $\{c_n\}$  包含了相干叠加中各项之间的相对相位。这样的态  $|\psi\rangle$  是纯态。如果我们只知道量子体系的状态处于本征态  $|k_n\rangle$  的概率, 即

$\{\omega_n = |c_n|^2\}$ , 则此处的  $\omega_n (\leq 1)$  是实数, 并有  $\sum_n \omega_n = 1$ 。当不为 0 的  $\omega_n$  大于 1 时, 状态就是统计混合态。密度矩阵

$$\rho = \sum \omega_n |k_n\rangle\langle k_n| \quad (5.3.2)$$

就是描述统计混合态的有效方法。 $\rho$  可以看作一个对角矩阵, 矩阵元为  $\rho_{nm} = \omega_n \delta_{nm}$ <sup>①</sup>。在条件  $\sum \omega_n = 1$  下, 有

$$\text{tr}\rho = 1 \quad (5.3.3)$$

密度矩阵是厄密的:

$$\rho^\dagger = \rho \quad (5.3.4)$$

我们来计算  $\rho^2$ :

$$\begin{aligned} \rho^2 &= \sum_{m,n} \omega_n \omega_m |k_n\rangle\langle k_n|k_m\rangle\langle k_m| \\ &= \sum_n \omega_n^2 |k_n\rangle\langle k_n| \end{aligned} \quad (5.3.5)$$

这里用了本征态的正交性:  $\langle k_n|k_m\rangle = \delta_{nm}$ 。一般情况下,  $\sum \omega_n = 1$  意味着  $\omega_n^2 < \omega_n$ , 除非只有一个系数  $\omega_l = 1$  而其他系数都为 0。一般情况下, 有

$$\text{tr}\rho^2 < \text{tr}\rho \quad (5.3.6a)$$

而在特殊情况下

$$\rho^2 = \rho \quad (5.3.6b)$$

这个特殊情况是  $\rho = |k_l\rangle\langle k_l|$ , 它相当于  $|\psi\rangle = |k_l\rangle$ , 是一个纯态。在此情况下,

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (5.3.7)$$

因此式(5.3.6a)是统计混合态的条件, 而式(5.3.6b)是纯态的条件。密度矩阵是描述量子体系的灵活方法, 不论它处于纯态还是统计混合态。如果式(5.3.7)中的态  $|\psi\rangle$  是以叠加态式(5.3.1)表述的, 就有

$$\rho = \sum_{m,n} c_m c_n^* |k_m\rangle\langle k_n| \quad (5.3.8)$$

这里密度矩阵有非对角元, 因为式(5.3.1)代表了表示的变换。式(5.3.7)的形式是对角矩阵,  $\omega_\psi = 1$ , 而所有其他的系数都为 0:  $\omega_\varphi = 0$ , 此处  $\varphi$  是和  $\psi$  正交的态。为了辨别一个密度矩阵代表的是纯态还是统计混合态, 必须先把矩阵对角化, 然后统计一下有多少非 0 的矩阵元。如果非 0 矩阵元的数目为 1, 则代表纯态。如果非 0 矩阵元的数目大于 1, 则代表混合态。

在  $x$  表示中, 有

$$\rho(x'x) \equiv \langle x' | \rho | x \rangle = \sum_k \omega_k \langle x' | k \rangle \langle k | x \rangle = \sum_k \omega_k \psi_k(x') \psi_k^*(x) \quad (5.3.9)$$

在以  $\rho$  代表的状态中, 任意可观测量  $\hat{A}$  的期望值是

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \sum_k \omega_k \langle k | \hat{A} | k \rangle = \int dx dx' \omega_k \langle k | x \rangle \langle x' | A | x \rangle \langle x' | k \rangle \\ &= \int dx dx' \langle x | \rho | x' \rangle \langle x' | A | x \rangle = \int dx dx' \rho(x, x') A(x', x) = \text{tr}\rho A \end{aligned} \quad (5.3.10)$$

① 在选定的表示中  $\rho$  是对角的。变换表示可以使它变为非对角的。

在统计力学中,考虑体系处于温度  $T$  的环境中。取本征态集  $|\varphi_i\rangle$ , 它们满足

$$\hat{H} |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle \quad (5.3.11)$$

则体系处于  $|\varphi_i\rangle$  的概率是

$$w_i = \frac{1}{Q} e^{-\beta E_i} \quad (5.3.12)$$

此处

$$\beta = \frac{1}{kT} \quad (5.3.13)$$

$$Q = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (5.3.14)$$

$Q$  是统计配分函数。密度矩阵可以写作

$$\rho = \frac{1}{Q} \sum_i e^{-\beta E_i} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = \frac{1}{Q} e^{-\beta \hat{H}} \quad (5.3.15)$$

最后一步是将  $e^{-\beta E_i} |\varphi_i\rangle$  换成  $e^{-\beta \hat{H}} |\varphi_i\rangle$ , 再用完备条件  $\sum_i |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| = 1$  得到的。有时为了简便,使用非归一的密度矩阵

$$\rho(\beta) = e^{-\beta \hat{H}} \quad (5.3.16)$$

此时,在求期待值等问题时需要小心。 $\rho(\beta)$  满足的方程是

$$-\frac{\partial \rho}{\partial \beta} = \hat{H} \rho \quad (5.3.17)$$

$$\rho(0) = 1 \quad (5.3.18)$$

在  $x$  表示中,有

$$\rho(x, x'; \beta) = \langle x | e^{-\beta \hat{H}} | x' \rangle \quad (5.3.19)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \beta} \rho(x, x'; \beta) = \hat{H}_x \rho(x, x'; \beta) \quad (5.3.20)$$

$$\rho(x, x'; 0) = \delta(x - x') \quad (5.3.21)$$

将式(5.3.19)与欧氏时空路径积分  $\langle x | \exp\left(-\frac{\hat{H}}{\hbar} \tau\right) | x' \rangle$  比较,发现它们竟如此相似: 只要设定

$$\tau = \hbar \beta = \frac{\hbar}{kT} \quad (5.3.22)$$

统计力学中的密度矩阵就可以用路径积分表示:

$$\rho(x, x'; \beta) = N \int [Dx(u)] \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^U \left\{ \frac{1}{2} m \dot{x}^2(u) + V[x(u)] \right\} du \right] \quad (5.3.23)$$

此处  $U = \hbar \beta$ 。体系所有的平衡态性质都能从密度矩阵得到。

为了印证用闵可夫斯基时空计算的式(5.1.43),这里用欧氏时空计算谐振子的密度矩阵,利用路径积分的一个重要性质。经典轨道的运动方程是

$$\ddot{X} - \omega^2 X = 0, \quad X(0) = x, \quad X(U) = x' \quad (5.3.24)$$

其解是

$$X = \frac{(x' - x e^{-\omega U}) e^{\omega u} + (x e^{\omega U} - x') e^{-\omega u}}{2 \sinh \omega U} \quad (5.3.25)$$

经典作用可以直接计算:

$$S_0 = \frac{m\omega}{2 \sinh \omega U} [(x'^2 + x^2) \cosh \omega U - 2xx'] \quad (5.3.26)$$

将满足边界条件的任意轨道  $x$  用  $X$  表示:

$$x(u) = X(u) + y(u), \quad y(0) = y(U) = 0 \quad (5.3.27)$$

其二阶变分是

$$\delta^2 S = \frac{m}{2} \int_0^U (\dot{y}^2 + \omega^2 y^2) du \quad (5.3.28)$$

前置因子和路径积分分别是

$$F(U) \equiv \int [Dy] \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^U \left( \frac{m}{2} \dot{y}^2 + \frac{m\omega^2}{2} y^2 \right) du \right] \quad (5.3.29)$$

$$\rho(x, x'; U) = e^{-S_0/\hbar} F(U) \quad (5.3.30)$$

利用路径积分的基本性质:

$$\rho(x, x'; U_1 + U_2) = \int \rho(x, x''; U_2) \rho(x'', x'; U_1) dx'' \quad (5.3.31)$$

它的意义是把“历史”分两步走: 有一个中间阶段  $x''$ , 两步分别用了虚时间  $U_1$  和  $U_2$ 。对“历史”求和, 中间值  $x''$  是任意的, 应该积分。用式(5.3.31)便可以解出前置因子  $F(U)$ 。将式(5.3.30)代入式(5.3.31):

$$\begin{aligned} & F(U_1 + U_2) \exp \left[ -\frac{S_0(x, x'; U_1 + U_2)}{\hbar} \right] \\ &= \int \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} [S_0(x, x''; U_2) + S_0(x'', x'; U_1)] \right\} F(U_1) F(U_2) dx'' \end{aligned}$$

将式(5.3.26)代入, 对  $x''$  积分, 得到  $F(U)$  满足的方程:

$$\begin{aligned} & F(U_1 + U_2) \left[ \frac{2 \hbar \pi \sinh \omega (U_1 + U_2)}{m \omega} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= F(U_1) \left[ \frac{2 \hbar \pi \sinh \omega U_1}{m \omega} \right]^{\frac{1}{2}} F(U_2) \left[ \frac{2 \hbar \pi \sinh \omega U_2}{m \omega} \right]^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (5.3.32)$$

因此解是

$$\left[ \frac{2 \hbar \pi \sinh U}{m \omega} \right]^{\frac{1}{2}} F(U) = e^{\alpha U}$$

或

$$F(U) = \left[ \frac{m \omega}{2 \hbar \pi \sinh U} \right]^{\frac{1}{2}} e^{\alpha U} \quad (5.3.33)$$

$\alpha$  可以从归一化决定。结果和式(5.1.43)相同。这里用了式(5.3.31)而没有直接对式(5.3.29)求积分, 是个巧妙的办法<sup>[3]</sup>。

在文献[3]中讨论了耦合体系的密度矩阵, 给出了计算步骤和最终结果。下面补充中间

计算<sup>①</sup>。

考虑一个与宏观量子隧穿有关的问题。这是一个耦合的体系，一个体系质量为  $M$ ，坐标是  $q$ ，在势  $V(q)$  中运动；另一个是谐振子，质量为  $m$ ，频率为  $\omega$ ，坐标为  $x$ ；二者之间有耦合  $-\gamma xq$ 。其哈密顿量为

$$H = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 + \frac{M\dot{q}^2}{2} + V(q) - \gamma xq \quad (5.3.34)$$

密度矩阵为

$$\begin{aligned} \rho(x, x'; U) = N \int [Dq][Dx] \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^U \left( \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 - \gamma qx \right) du \right] \times \\ \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^U \left( \frac{M\dot{q}^2}{2} + V(q) \right) du \right] \end{aligned} \quad (5.3.35)$$

边界条件为

$$x(0) = x, \quad x(U) = x'$$

一般情况下，路径积分不能积出。但可以试图将  $x$  的泛函由积分积出，得到体系  $q$  的有效作用量。将符号稍作改变，对以下路径积分求值：

$$\begin{aligned} F[f; x, x'] = \int [Dx] \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_0^U \left( \frac{m}{2}\dot{x}^2 + \frac{m}{2}\omega^2 x^2 + if(u)x \right) du \right] \\ x(0) = x, \quad x(U) = x' \end{aligned} \quad (5.3.36)$$

从  $x$  的欧拉-拉格朗日方程看：

$$\ddot{X} - \omega^2 X = \frac{i}{m} f(u) \quad (5.3.37)$$

是受迫振子。仍用  $x = X + y$ ，则作用量变为

$$\begin{aligned} S = \int_0^U \left[ \frac{m}{2} (\dot{X} + \dot{y})^2 + \frac{m\omega^2}{2} (X + y)^2 + if(X + y) \right] du \\ = \int \frac{m}{2} \left[ \dot{X}^2 + \omega^2 X^2 + \frac{2}{m} ifX \right] du + \int m \left[ \dot{X}\dot{y} + \omega^2 Xy + \frac{2}{m} ify \right] du + \\ \int \frac{m}{2} (\dot{y}^2 + \omega^2 y^2) du \end{aligned}$$

第二个积分的第一项可以变换为  $\int \dot{X}\dot{y} du = \dot{X}y \Big|_0^U - \int_0^U \ddot{X}y du$ ，因此第二个积分变为  $\int m \left[ -\ddot{X} + \omega^2 X + \frac{i}{m} f(u) \right] y du$ ，它由于运动方程而等于 0。第三个积分给出了谐振子的前置因子： $\sqrt{m\omega/2\pi\hbar\sinh\omega U}$ 。运动方程式(5.3.37)用参数变分法求解，即

$$X(u) = (c_1 + y_1)e^{\omega u} + (c_2 + y_2)e^{-\omega u} \quad (5.3.38)$$

此处

$$\left. \begin{aligned} y_1 &= \frac{i}{2m\omega} \int_0^u f(u) e^{-\omega u} du \\ y_2 &= -\frac{i}{2m\omega} \int_0^u f(u) e^{\omega u} du \end{aligned} \right\} \quad (5.3.39)$$

<sup>①</sup> 吕嵘同志参加了结果的推导，特此致谢。

使用  $X(0)=x, X(U)=x'$ , 即可将  $c_1$  和  $c_2$  求出, 它们是  $x, x', U$  以及两个常数  $A$  和  $B$  的函数:

$$\left. \begin{aligned} A &= \frac{i}{2m\omega} \int_0^U e^{-\omega u} f(u) du \\ B &= \frac{i}{2m\omega} \int_0^U e^{\omega(U-u)} f(u) du \end{aligned} \right\} \quad (5.3.40)$$

经典作用量的计算如下:

$$\begin{aligned} S_0 &= \frac{m}{2} \int_0^U \left( \dot{X}^2 + \omega^2 X^2 + \frac{2}{m} i f(u) X \right) du \\ &= \frac{m}{2} \left[ \dot{X} X \Big|_0^U + \int_0^U \left( -\ddot{X} + \omega^2 X + \frac{2}{m} i f \right) X du \right] \\ &= \frac{m}{2} \left[ \dot{X} X \Big|_0^U + \int_0^U \frac{i}{m} f(u) X du \right] \end{aligned}$$

将  $X$  (式(5.3.38)和式(5.3.39))代入, 结果是

$$\begin{aligned} S_0 &= \frac{1}{4m\omega} \int_0^U \int_0^U e^{-\omega|u-u'|} f(u) f(u') du du' + \\ &\quad \frac{m\omega}{2\sinh\omega U} \left[ (x^2 + x'^2) \cosh\omega U - 2xx' + 2A(xe^{\omega U} - x') + \right. \\ &\quad \left. 2B(x'e^{\omega U} - x) + (A^2 + B^2)e^{\omega U} - 2AB \right] \end{aligned} \quad (5.3.41)$$

至此, 已将  $F$  (式(5.3.36))算出:

$$F[f, x, x'] = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \hbar \sinh\omega U}} e^{-S_0/\hbar} \quad (5.3.42)$$

在实际应用中需要计算以下  $f$  的泛函:

$$\mathcal{E}[f] \equiv \frac{\int F[f, x, x] dx}{\int F(0, x, x) dx} \quad (5.3.43)$$

$F$  的前置因子不参与积分, 在  $\mathcal{E}[f]$  中约去。分母的积分为

$$\int \exp \left[ -\frac{m\omega}{\hbar \sinh\omega U} (\cosh\omega U - 1)x^2 \right] dx = \left( \frac{\pi \hbar \sinh\omega U}{m\omega (\cosh\omega U - 1)} \right)^{1/2} \quad (5.3.44)$$

分子的  $F[f, x, x]$  中的  $S_0|_{x'=x}$  是

$$\begin{aligned} S_0|_{x'=x} &= \frac{1}{4m\omega} \int_0^U \int_0^U e^{-\omega|u-u'|} f(u) f(u') du du' + \\ &\quad \frac{m\omega}{\sinh\omega U} \left[ x^2 (\cosh\omega U - 1) + (A+B)(e^{\omega U} - 1)x + \right. \\ &\quad \left. \left( \frac{A^2 + B^2}{2} \right) e^{\omega U} - AB \right] \end{aligned} \quad (5.3.45)$$

上式的第二项经过整理, 变为

$$\frac{m\omega}{\sinh\omega U} \left\{ (\cosh\omega U - 1) \left[ x + \frac{1}{2} \frac{(A+B)(e^{\omega U} - 1)}{\cosh\omega U - 1} \right]^2 - AB(1 + e^{\omega U}) \right\} \quad (5.3.46)$$

花括号中的第一项是与  $x$  有关的, 代入式(5.3.43)分子的  $\int \exp[-S_0|_{x=x'}/\hbar] dx$  积分, 结果

是  $\left[ \frac{\pi \hbar \sinh \omega U}{m \omega (\cosh \omega U - 1)} \right]^{1/2}$ , 正好和分母的积分式(5.3.44)约掉。至此, 对  $\mathcal{E}[f]$  有贡献的只余下式(5.3.45)的第一项和式(5.3.46)花括号中的第二项:

$$\mathcal{E}[f] = \exp \left[ - \frac{1}{4m\omega\hbar} \int_0^U \int_0^U e^{-\omega|u-u'|} f(u)f(u') du du' + \frac{m\omega}{\hbar \sinh \omega U} (1 + e^{\omega U}) AB \right] \quad (5.3.47)$$

将

$$AB = - \frac{1}{4m^2\omega^2} \int_0^U \int_0^U e^{-\omega u} e^{-\omega(u-u')} f(u)f(u') du du' \quad (5.3.48)$$

代入, 再经过整理, 最后可以得到

$$\mathcal{E}[f] = \exp \left[ - \frac{1}{4m\omega\hbar} \int_0^U \int_0^U \frac{\cosh \left( \omega |u-u'| - \frac{\omega U}{2} \right)}{\sinh \frac{\omega U}{2}} f(u)f(u') du du' \right] \quad (5.3.49)$$

## 5.4 衰变态的瞬子方法

考虑如图 5.6 所示的势和力学模拟。如果不考虑势垒隧穿, 则在阱底可以有一个基态。现在有了隧穿, 能否和双阱问题一样用路径积分计算对能量的修正呢? 从力学模拟的角度看, 经典轨道是从  $\tau = -\infty, X=0$  到  $\tau=0, X=\sigma$ , 此时速度降为 0, 开始走回头路, 最后于  $\tau = +\infty$  时回到  $X=0$ 。轨道示于图 5.7。这个解称为“回弹解”(bounce solution), 即它到了

$\sigma$  就被弹回了(图 5.6)。如果计算  $\langle 0 | \exp \left( -\frac{\hat{H}}{\hbar} \tau_0 \right) | 0 \rangle$ , 似乎和双阱类似, 也能对一串回弹解求和, 最后得到类似  $\left( \frac{\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/2} e^{-\omega \tau_0/2} \times \exp(K \tau_0 e^{-S_0/\hbar})$  的结果, 当然  $S_0$  和  $\omega$  与双阱情况不同。

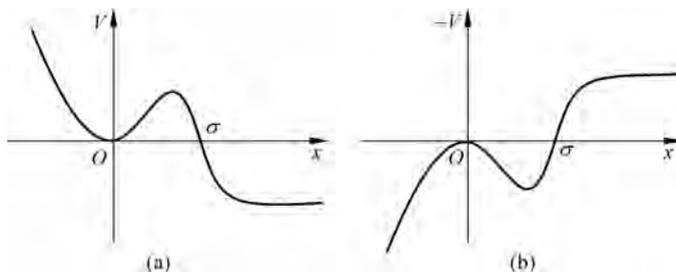


图 5.6 势和力学模拟

(a) 势; (b) (a) 的力学模拟

然而, 实际情况并不如此简单。首先, 算出的修正比去掉的量还小, 而且这里又没有劈裂, 计算它有什么意义呢? 其次, 回弹解有一个极大值, 即  $\frac{dX}{d\tau}$  在此为 0; 它有一个节点。从束缚态能级的性质看, 零模解有节点, 就应该还有一个能量更低(能量为负值)的无节点的

解, 与  $\prod_i \lambda_i^{-1/2}$  成正比的因子  $K$  就会是虚数。还有, 从图 5.6(a) 的势看, 势垒穿透将使原居阱底的态成为不稳定的。

确实, 在阱中的态是不稳定的, 这使它的能量有虚部, 这个虚部决定态的衰变率。态的不稳定是由势垒隧穿造成的, 也应由路径积分算出。对能量的修正如果是实的, 则不好保留, 因为弃去的部分还会比它大。但虚部恰恰是需要保留的, 因为它已是带头项(不考虑隧穿的原能量没有虚部), 而且它要给出态的衰变率。结果的形式将会是

$$\text{Im}E_0 = \frac{\Gamma}{2} = \hbar |K| e^{-S_0/\hbar} \quad (5.4.1)$$

$\Gamma$  是不稳定态的能级宽度。在计算前置因子中, 令  $\lambda_{-1}$  代表本征问题的负本征值,  $c_{-1}$  代表  $x(\tau)$  展开时负本征值态  $u_{-1}$  前的系数。这样对  $c_{-1}$  的积分会是

$$\int \frac{dc_{-1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{1}{2\hbar} c_{-1}^2 \lambda_{-1}\right) = \int \frac{dc_{-1}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{1}{2\hbar} |\lambda_{-1}| c_{-1}^2\right) \quad (5.4.2)$$

它是发散的。另一方面, 从  $\prod_i \lambda_i^{-1/2}$  看, 有  $\frac{1}{\sqrt{\lambda_{-1}}} = \frac{i}{\sqrt{|\lambda_{-1}|}}$ 。实际情况究竟如何呢? 可以试

用解析延拓方法。先设式(5.4.2)左侧的  $\lambda_{-1}$  为正值, 积分后得到  $\frac{1}{\sqrt{\lambda_{-1}}}$ , 然后将  $\lambda_{-1}$  延拓到负值, 有  $\frac{i}{\sqrt{|\lambda_{-1}|}}$ 。之后, 会得到结果的形式是  $\text{Im}E_0 = \frac{\Gamma}{2} = \hbar |K| e^{-S_0/\hbar}$ , 它只比正确值少一个因子 1/2。这说明解析延拓要做得更细些<sup>[8]</sup>。为了剖析解析延拓的做法, 只在部分函数空间中考虑一族以实参数  $z$  表征的历史, 有

$$J(z) = \int \frac{dz}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-S(z)/\hbar} \quad (5.4.3)$$

这些轨道示于图 5.8。  $z=1$  相当于回弹轨道, 它的作用量是极大值。  $z$  更大的轨道由于粒子在大  $x$  值处 ( $V$  值为负) 停留较长的(虚)时间, 使作用量减小。作用量与  $z$  的关系示于图 5.9。由于随  $z$  的增加,  $S(z)$  迅速变为更大的负值, 积分式(5.4.3)会发散。由于这类计算是对定态(而非衰变态)进行的, 直接搬到图 5.6(a) 的势中并不合适。应该从图 5.10(a) 的势开始将它逐步扭曲趋向图 5.6(a), 当作用量在  $z=1$  处达到极大值之后, 真实势(图 5.6(a))的作用量将偏离图 5.10(b) 的曲线, 当曲线在  $z>1$  时迅速向下弯, 再继续原有的积分路径(沿  $z$  轴)就不行了。为了使积分有限并能给出虚部, 应将积分路径从  $z=1$  处扭曲到复平面, 如图 5.11 所示。此处假设势的扭曲决定积分回路向上半平面扭曲。从鞍点  $z=1$  向上方积分, 用最大速率下降近似计算, 有

$$J = \left[ \int_{-\infty}^1 + \int_1^{1+i\infty} \right] \frac{dz}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-S(z)/\hbar}$$

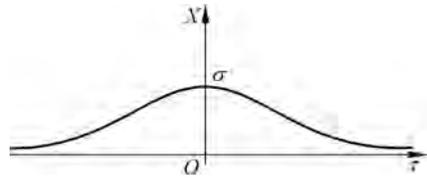


图 5.7 回弹解

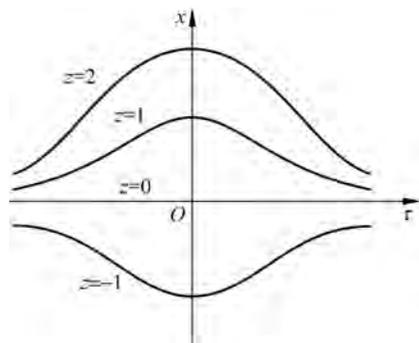
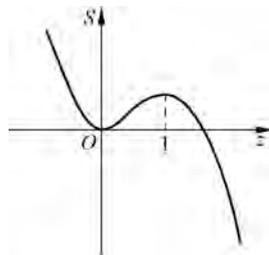
图 5.8 一族用参数  $z$  表征的轨道

图 5.9 轨道的作用量

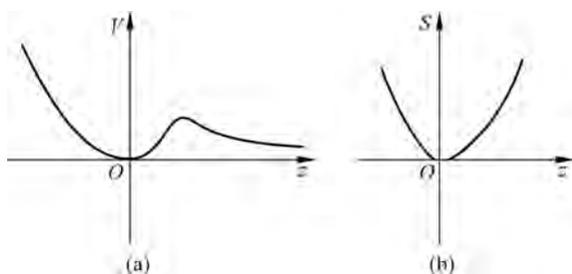


图 5.10 给出束缚态的势

(a) 势函数; (b) 不同轨道的作用量

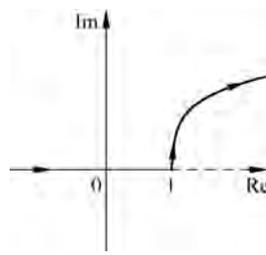


图 5.11 变化的积分回路

第一个积分给出实数。令  $z=1+iy$ , 则第二个积分是

$$J' = i \int_0^{\infty} dy \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\left[S(1) + \frac{1}{2}S''(1)(iy)^2\right]/\hbar\right)$$

此处  $S''(y)$  在  $y=1$  处是负值。因此  $J$  的虚部是

$$\begin{aligned} \text{Im}J &= \int_0^{\infty} \frac{dy}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\left[S(1) - \frac{1}{2}S''(1)y^2\right]/\hbar\right) \\ &= \frac{1}{2} e^{-S(1)/\hbar} |S''(1)|^{-1/2} \end{aligned} \quad (5.4.4)$$

重要的  $1/2$  因子的来源是, 此处高斯积分是从  $0$  积到  $\infty$  的, 其值为自  $-\infty$  积到  $+\infty$  的积分值的  $1/2$ 。可以将以上模型式的讨论进行推广:

$$\left. \begin{aligned} \text{Im}K &= \frac{1}{2} \left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} \left[ \frac{\det' \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(X)\right)}{\det \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \omega^2\right)} \right] \\ \Gamma &= 2\hbar |K| e^{-S_0/\hbar} = \hbar \left(\frac{S_0}{2\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{-S_0/\hbar} \left[ \frac{\det' \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(X)\right)}{\det \left(-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + \omega^2\right)} \right]^{-1/2} \end{aligned} \right\} \quad (5.4.5)$$

Callan-Coleman 方法<sup>[8]</sup>对于上述讨论没有进行严格证明, 该想法是受 J. S. Langer<sup>[9]</sup>处理相

变问题的方法启发而来的。

作为一个例子, 在 5.4.1 节中讨论了“二次加三次”势的隧穿问题<sup>①</sup>。一方面可以印证本节讨论的与回弹解相应的本征问题具有负本征值而可以直接计算出能量虚部; 另一方面还可以介绍在行列式的比例计算上的一些有效方法。相关结果将用于第 6 章。

实际上, 对一些具体问题可以直接计算二次变分的路径积分, 而不涉及算符  $-\frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''(X)$  的本征函数展开。这一点将在 5.4.2 节中讨论。

关于本节的内容, 请参阅文献[6]。

本章讨论的相干劈裂和衰变态瞬子方法, 都属于路径积分的背景场计算方法。它是一种近似方案, 其特点是主要贡献来自经典轨道。作用量的一阶变分  $\delta S$  为 0 表示经典轨道的贡献, 即它给出了作用量的极值。二阶变分  $\delta^2 S$  表示量子涨落的贡献。为了保证远离经典轨道的贡献很小, 必须把时间  $t$  变为  $i\tau$ , 即从闵可夫斯基空间转到欧氏空间。这样, 轨道的权重因子将出现 ( $e^{-S}$ ), 保证经典轨道 ( $S$  最小) 对路径积分的贡献最大, 远离它的轨道的贡献指数衰减。因此, 背景场方法只是一种半经典近似的简便框架, 尤其是当经典方程是非线性方程时, 这种量子化是在它的经典解基础上进行的, 即在经典孤子的基础上考虑量子涨落。

要强调的是路径积分方法本身是量子力学的一种表述, 它并不包含任何近似, 同时量子化方案绝不是唯一的。从量子理论到其经典极限, 可以用唯一的途径实现。但给定经典理论后, 要从它出发去构造量子理论, 本质上是要引入普朗克常数的一种“变形”(deformation)<sup>②</sup>, 途径并不唯一。从经典泊松括号到量子泊松括号(对易子)是一种推广。但这种方法对费米子并不适用, 应改用反对易子。判断量子化方案是否正确的基本原则是, 量子理论应该包含经典极限, 理论应有内在的自洽, 当然更重要的是, 理论预言与实验结果符合。正则量子化是我们熟悉的。从正则量子化方案还演化出了一种“对应原理量子化”。设波函数  $\psi$  为哈密顿量某一对称群的表示。在对称变换下,  $\psi$  的变化是  $\delta\psi$  ( $c$  数)。令  $\hat{Q}$  为与对称变换相对应的守恒量生成元, 它通过二次量子化的算符  $\hat{\psi}$  和  $\hat{\psi}^\dagger$  表示, 它们满足一定的对易关系。对应原理量子化要求  $\delta\psi \propto [\hat{\psi}, \hat{Q}]$ <sup>③</sup>, 通过这个要求可以得到生成元  $\hat{Q}$  的形式。通常在线性问题中,  $\hat{\psi}$  满足的正则对易关系给出了熟知的  $\hat{Q}$  生成元形式。在非线性问题中, 实际使用的对易关系不一定是正则的。这时原则上可以通过经典变分形式  $\delta\psi$  找出相应的守恒量  $\hat{Q}$  的形式。路径积分原则上可以给出不做近似的量子力学计算, 其谐振子精确解便是一例, 结果当然和正则量子化完全一致。路径积分形式通过法捷耶夫-波波夫理论<sup>[10]</sup> 可以推广到普遍量子场论。在非阿贝尔规范场的量子化中, 它提供很自然的理论框架, 将么正性与可重整化性统一到一个理论构架之中。

在路径积分的具体计算中都用了虚时间  $\tau = it$ , 这样才能在欧氏时空进行计算。取虚时间的办法称为“威克转动”(Wick rotation), 在物理学中是经常应用的。对于路径积分, 一些

① “二次加三次”势的隧穿结果首先由 A. O. Caldeira 给出(博士学位论文, 萨塞克斯大学, 1980), 在文献[13]中引用了结果。

② 这是法捷耶夫的提法, 他称从量子到经典的过程为“收缩”(contraction)。

③ 左侧  $\delta\psi$  是  $c$  数, 右侧对易括号中的  $\hat{\psi}$  是算符, 故称“对应原理量子化”。

数学家的意见是有所保留的,他们认为威克转动在数学上是不够严格的。

### 5.4.1 “二次加三次”势的隧穿

考虑“二次加三次”势(图 5.12(a))和它的力学模拟(5.12(b))。势的形式是

$$\begin{aligned} V(q) &= \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 - \beta q^3 \\ &= \frac{27}{4}V_0 \left[ \left(\frac{q}{q_0}\right)^2 - \left(\frac{q}{q_0}\right)^3 \right] \end{aligned} \quad (5.4.6)$$

此处

$$q_0 = \frac{m\omega^2}{2\beta}, \quad V_0 = \frac{1}{54} \frac{(m\omega^2)^3}{\beta^2}$$

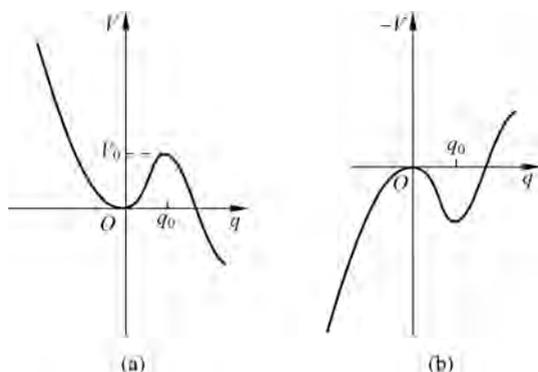


图 5.12 “二次加三次”势及其力学模拟

(a) “二次加三次”势; (b) (a)的力学模拟

计算隧穿率也是由计算经典作用、经典轨道、前置因子几个步骤组成的<sup>①</sup>。从力学模拟看出,经典轨道(回弹解)是  $q\left(-\frac{\tau_0}{2}\right)=0, q(0)=q_0, q\left(\frac{\tau_0}{2}\right)=0, \tau_0 \rightarrow \infty$ 。经典轨道是零能量解,因此,经典作用量是

$$S_0 = \int \left( \frac{1}{2}m\dot{q}^2 + V(q) \right) d\tau = \int m\dot{q}^2 d\tau = \int m\dot{q} d\dot{q} = 2 \int_0^{q_0} \sqrt{2mV(q)} dq$$

将式(5.4.6)代入,得

$$S_0 = 2q_0 \left( \frac{27}{2}mV_0 \right)^{1/2} \int_0^{q_0} \left[ \left(\frac{q}{q_0}\right)^2 - \left(\frac{q}{q_0}\right)^3 \right]^{1/2} d\left(\frac{q}{q_0}\right) = \frac{36V_0}{5\omega} \quad (5.4.7)$$

经典轨道满足的方程是

$$\frac{1}{2}m\dot{q}^2 = \frac{27}{4}V_0 \left\{ \left(\frac{q}{q_0}\right)^2 - \left(\frac{q}{q_0}\right)^3 \right\}$$

满足边界条件  $q(-\infty)=q(\infty)=0, q(0)=q_0$  的解是

$$X(\tau) = q_0 \operatorname{sech}^2 \frac{1}{2q_0} \sqrt{\frac{27V_0}{2m}} \tau \quad (5.4.8)$$

<sup>①</sup> 相关工作基于陈欣同志的推导,特此致谢。

计算前置因子要先求解一个本征问题, 本征方程是(放进质量)

$$-m \frac{d^2 x_n}{d\tau^2} + V''(X)x_n = \lambda_n x_n \quad (5.4.9)$$

其中  $V''$  是势  $V$  的二次微商

$$V''(q) = \frac{27V_0}{2q_0^2} \left(1 - 3 \frac{q}{q_0}\right)$$

因此有

$$V''(X) = \frac{27V_0}{2q_0^2} \left[ 1 - \frac{3}{\cosh^2 \frac{1}{2q_0} \sqrt{\frac{27V_0}{2m}} \tau} \right] \quad (5.4.10)$$

定义新参数

$$\left. \begin{aligned} E_n &= \frac{\lambda_n - \frac{27}{2}V_0 \frac{1}{q_0^2}}{2m} \equiv \frac{\lambda_n - \omega^2}{2m} \\ V &= \frac{81V_0}{4mq_0^2}, \quad a = 2q_0 \sqrt{\frac{2m}{27V_0}} \end{aligned} \right\} \quad (5.4.11)$$

并加以整理, 方程(5.4.9)变为<sup>①</sup>

$$\frac{d^2 x_n}{d\tau^2} + 2 \left[ E_n + \frac{V}{\cosh^2 \frac{\tau}{a}} \right] x_n = 0 \quad (5.4.12)$$

势能  $V(\tau) = \frac{V}{\cosh^2 \frac{\tau}{a}}$  示于图 5.13。方程的正本征值是

连续的, 负本征值是分立的, 它们是

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{1}{2a^2} \left[ \frac{1}{2} \sqrt{8V_a^2 + 1} - \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^2 \\ &= -\frac{\omega^2}{8m} (3-n)^2, \quad n=0, 1, 2 \end{aligned} \quad (5.4.13)$$

由式(5.4.11)转换为我们需要的  $\lambda_n$ :

$$\lambda_n = \omega^2 \left(1 - \frac{1}{4}(3-n)^2\right) \quad (5.4.14)$$

三个分立的 本征值是

$$\lambda_0 = -\frac{5}{4}\omega^2, \quad \lambda_1 = 0, \quad \lambda_2 = \frac{3}{4}\omega^2 \quad (5.4.15)$$

对于连续本征值, 从式(5.4.11)定义

$$k = \sqrt{2mE} = \sqrt{\lambda_n - \omega^2} \quad (5.4.16)$$

回顾一下与谐振子有关的本征问题:

$$-m \frac{d^2 x_n}{d\tau^2} + \omega^2 x_n = \lambda_n x_n$$

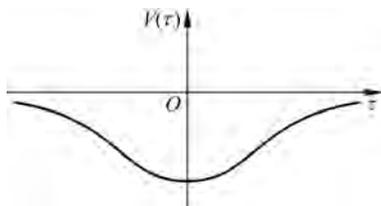


图 5.13 本征方程的势

<sup>①</sup> 可参阅文献[12], 73 页。

它的本征值  $\lambda_n$  是式(5.1.34):

$$\lambda_n = \omega^2 + \frac{n^2 \pi^2}{\tau_0^2}$$

上式是用方程的解加上边界条件  $x_n\left(\pm \frac{\tau_0}{2}\right) = 0$  求出的。相应的  $k$  值是

$$k = \sqrt{\lambda_n - \omega^2} = \frac{n\pi}{\tau_0} \quad (5.4.17)$$

因此,当  $\tau_0$  较大但有限时,  $k$  的谱是准连续的,其间距是  $\pi/\tau_0$ 。本征方程(5.4.12)也需加上边界条件  $x_n\left(\pm \frac{\tau_0}{2}\right) = 0$ , 求出本征值谱。定义

$$\xi = \tanh \frac{\omega\tau}{2} \quad (5.4.18)$$

的解是超几何函数

$$x = (1 - \xi^2)^{-i\frac{k}{\omega}} F\left[-i\frac{2k}{\omega} - 3, -i\frac{2k}{\omega} + 4, -i\frac{2k}{\omega} + 1, \frac{1}{2}(1 - \xi)\right] \quad (5.4.19)$$

$\xi$  是含  $\tau$  的独立变量,  $k$  与  $\lambda_n$  有关(式(5.4.16)), 将由边界条件确定,  $\omega$  的定义包含于式(5.4.11):

$$\omega = \frac{27}{2} V_0 \frac{1}{q_0^2} \quad (5.4.20)$$

$V_0$  和  $q_0$  都是“二次加三次”的势参数。方程本有两个线性独立的解, 此处选择了式(5.4.19), 因为另一个解在原点是奇异的。运用边界条件( $\tau_0$  很大)只需知道解的渐近行为。当  $\tau \rightarrow \pm\infty$  时, 独立变量的极限如下:

$$\left. \begin{aligned} \text{当 } \tau \rightarrow +\infty \text{ 时, } \quad & \tanh \frac{\omega\tau}{2} \rightarrow 1 - 2e^{-\omega\tau}, \quad \frac{1}{2}(1 + \xi) \rightarrow 1, \quad \frac{1}{2}(1 - \xi) \rightarrow e^{-\omega\tau}, \\ & (1 - \xi^2)^{-i\frac{k}{\omega}} \rightarrow e^{ik\tau} \\ \text{当 } \tau \rightarrow -\infty \text{ 时, } \quad & \tanh \frac{\omega\tau}{2} \rightarrow -1 + 2e^{\omega\tau}, \quad \frac{1}{2}(1 - \xi) \rightarrow 1, \quad \frac{1}{2}(1 + \xi) \rightarrow e^{\omega\tau}, \\ & (1 - \xi^2)^{-i\frac{k}{\omega}} \rightarrow e^{-ik\tau} \end{aligned} \right\} \quad (5.4.21)$$

求解式(5.4.19)的渐近行为如下:

$$\left. \begin{aligned} \text{当 } \tau \rightarrow +\infty \text{ 时, } \quad & x \rightarrow e^{ik\tau} F(\quad, \quad, \quad, 0) = e^{ik\tau} \\ \text{当 } \tau \rightarrow -\infty \text{ 时, } \quad & x \rightarrow e^{-ik\tau} F(\quad, \quad, \quad, 1) \end{aligned} \right\} \quad (5.4.22)$$

运用公式<sup>①</sup>

$$\begin{aligned} F\left(\alpha, \beta, \gamma, \frac{1}{2}(1 - \xi)\right) &= \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\gamma - \alpha - \beta)}{\Gamma(\gamma - \alpha)\Gamma(\gamma - \beta)} F\left(\alpha, \beta, \alpha + \beta + 1 - \gamma; \frac{1}{2}(1 + \xi)\right) + \\ & \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\alpha + \beta - \gamma)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \left(\frac{1}{2}(1 + \xi)\right)^{\gamma - \alpha - \beta} \times \\ & F\left(\gamma - \alpha, \gamma - \beta, \gamma + 1 - \alpha - \beta, \frac{1}{2}(1 + \xi)\right) \end{aligned} \quad (5.4.23)$$

<sup>①</sup> 见文献[12], 附录 E, 659 页。

可以将  $\tau \rightarrow -\infty$  和  $\tau \rightarrow +\infty$  的解联系起来。解式(5.4.19)的  $\gamma - \beta = -3$ , 而  $\Gamma(-3) = \infty$ , 故式(5.4.23)的第一项为 0。在  $\tau \rightarrow -\infty$  时,

$$\begin{aligned} F\left(-i\frac{2k}{\omega} - 3, -i\frac{2k}{\omega} + 4, -i\frac{2k}{\omega} + 1, 1\right) \\ = -\frac{\left(1 + i\frac{2k}{\omega}\right)\left(1 + i\frac{k}{\omega}\right)\left(1 + i\frac{2k}{3\omega}\right)}{\left(1 - i\frac{2k}{\omega}\right)\left(1 - i\frac{k}{\omega}\right)\left(1 - i\frac{2k}{3\omega}\right)} e^{i2k\tau} \end{aligned} \quad (5.4.24)$$

即当  $\tau \rightarrow -\infty$  时,

$$x = -e^{ik\tau} \frac{\left(1 + i\frac{2k}{\omega}\right)\left(1 + i\frac{k}{\omega}\right)\left(1 + i\frac{2k}{3\omega}\right)}{\left(1 - i\frac{2k}{\omega}\right)\left(1 - i\frac{k}{\omega}\right)\left(1 - i\frac{2k}{3\omega}\right)} \quad (5.4.25)$$

式(5.4.22)的第一式给出当  $\tau \rightarrow +\infty$  时,  $x = e^{ik\tau}$ 。因此在  $\tau \rightarrow -\infty$  时,  $x$  应是  $x = e^{ik\tau} e^{i\delta_k}$ ,  $\delta_k$  是散射相移。故式(5.4.25)给出

$$e^{i\delta_k} = -\frac{\left(1 + i\frac{2k}{\omega}\right)\left(1 + i\frac{k}{\omega}\right)\left(1 + i\frac{2k}{3\omega}\right)}{\left(1 - i\frac{2k}{\omega}\right)\left(1 - i\frac{k}{\omega}\right)\left(1 - i\frac{2k}{3\omega}\right)} \quad (5.4.26)$$

方程对  $\tau \rightarrow -\tau$  是对称的, 对向  $-\tau$  方向的传播结果也是一样的。综合上述结果, 方程连续态有两个线性独立的解:

$$x_k(\tau) \rightarrow \begin{cases} e^{ik\tau}, & \tau \rightarrow +\infty \\ e^{ik\tau + i\delta_k}, & \tau \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (5.4.27)$$

$$x_k(\tau) \rightarrow \begin{cases} e^{-ik\tau}, & \tau \rightarrow +\infty \\ e^{-ik\tau + i\delta_k}, & \tau \rightarrow -\infty \end{cases} \quad (5.4.28)$$

通解为

$$x_k = Ax_k(\tau) + Bx_k(-\tau) \quad (5.4.29)$$

边界条件  $x\left(\pm\frac{\tau_0}{2}\right) = 0$  给出

$$\left. \begin{aligned} Ax_k\left(\frac{\tau_0}{2}\right) + Bx_k\left(-\frac{\tau_0}{2}\right) &= 0 \\ Ax_k\left(-\frac{\tau_0}{2}\right) + Bx_k\left(\frac{\tau_0}{2}\right) &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (5.4.30)$$

A 和 B 存在非零解的条件是

$$\frac{x_k(\tau_0/2)}{x_k(-\tau_0/2)} = \pm 1 \quad (5.4.31)$$

对于足够大的  $\tau_0$ , 式(5.4.31)、式(5.4.27)和式(5.4.28)给出

$$\exp\left(ik\frac{\tau_0}{2}\right) = \pm \exp\left(-ik\frac{\tau_0}{2} + i\delta_k\right)$$

即

$$e^{ik\tau_0 - i\delta_k} = \pm 1$$

亦即

$$k\tau_0 - \delta_k = n\pi, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.4.32)$$

第  $n$  个本征值  $\tilde{k}_n$  是<sup>①</sup>

$$\tilde{k}_n = \frac{n\pi + \delta_k}{\tau_0} \quad (5.4.33)$$

相应的  $\lambda_n$  是

$$\lambda_n = \tilde{k}_n^2 + \omega^2 \quad (5.4.34)$$

下面先计算分立本征值的  $\frac{\det'(-\partial_\tau^2 + V'')}{\det(-\partial_\tau^2 + \omega^2)}$ , 它是

$$-\frac{5}{4}\omega^2 \cdot \frac{3}{4}\omega^2 \\ \frac{\omega^2 \cdot \omega^2 \cdot \omega^2}{16\omega^2} = -\frac{15}{16\omega^2} \quad (5.4.35)$$

分子由于是  $\det'$  已将零本征值去掉。对于准连续谱, 有

$$\prod_{n=1}^{\infty} \frac{\omega^2 + \tilde{k}_n^2}{\omega^2 + k_n^2} = \exp \left[ \sum_n \ln \left( 1 + \frac{\tilde{k}_n^2 - k_n^2}{\omega^2 + k_n^2} \right) \right] \quad (5.4.36)$$

指数上的求和计算如下: 当  $\tau_0$  足够大时, 有  $\tilde{k}_n^2 - k_n^2 \approx 2k_n(\tilde{k}_n - k_n)$ , 另有  $\tilde{k}_n - k_n = \frac{\delta_k}{\tau_0}$ 。因而有

$$\ln \left( 1 + \frac{\tilde{k}_n^2 - k_n^2}{\omega^2 + k_n^2} \right) \approx \frac{2k_n \delta_k}{\tau_0 (\omega^2 + k_n^2)}$$

于是得到

$$\sum_n \ln \left( 1 + \frac{\tilde{k}_n^2 - k_n^2}{\omega^2 + k_n^2} \right) \approx \frac{\tau_0}{\pi} \int_0^\infty dk \frac{2k \delta_k}{\tau_0 (\omega^2 + k^2)} \\ = \frac{1}{\pi} \int_{k=0}^{k=\infty} \delta_k d \ln(\omega^2 + k^2) \quad (5.4.37)$$

式(5.4.37)与  $\tau_0$  无关, 通过分部积分并利用式(5.4.26), 得到上式等于  $\ln \frac{4}{225}$ 。因此

式(5.4.36)的值是  $\frac{4}{225}$ 。再考虑式(5.4.35)的贡献,  $\frac{\det'}{\det}$  的值是  $-\frac{15}{16\omega^2} \frac{4}{225} = -\frac{1}{60\omega^2}$ 。因此

此有

$$\left[ \frac{\det'(-\partial_\tau^2 + V''(X))}{\det(-\partial_\tau^2 + \omega^2)} \right]^{-\frac{1}{2}} = i\sqrt{60}\omega$$

而宽度  $\Gamma$  由式(5.4.5)给出:

$$\Gamma = \sqrt{60}\omega \left( \frac{S_0}{2\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-S_0/\hbar} = \sqrt{60}\omega \left( \frac{18V_0}{5\pi\hbar\omega} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-36V_0/5\hbar\omega} \quad (5.4.38)$$

① 记为  $\tilde{k}$  以区别于与谐振子有关的本征值。

## 5.4.2 计算路径积分二次变分的平移法

这个计算不对  $\hat{M} \equiv -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \tau^2} + V''$  进行本征函数的展开, 而是采用一个映射。该方法是 R. Dashan, B. Hasslacher, A. Neveu<sup>[13]</sup> 首先在场论中计算能谱时使用的, 他们使用的是实时间。梁九卿和 H. J. W. Müller-Kirsten<sup>[11]</sup> 将此法用于量子隧穿问题, 使用虚时间, 称为“平移法”(shifting method), 以下做简单介绍。路径在经典解  $x_c$  附近展开,  $x = x_c + y$ , 二阶变分对路径积分的贡献是

$$I = \int [Dy] e^{-\delta^2 S_E} = \int [Dy] \exp\left(-\int_{-T}^T y \hat{M} y d\tau\right) \quad (5.4.39)$$

此处

$$\hat{M} = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{d\tau^2} + V''(x_c) \quad (5.4.40)$$

$y$  满足边界条件:

$$y(\pm T) = 0$$

引入映射  $y \rightarrow z$ :

$$z(\tau) = y(\tau) - \int_{-T}^{\tau} \frac{\dot{N}(\tau')}{N(\tau')} y(\tau') d\tau' \quad (5.4.41)$$

此处  $N(\tau)$  满足方程

$$\left[ \frac{d^2}{d\tau^2} - 2V''(x_c) \right] N(\tau) = 0 \quad (5.4.42)$$

即  $N(\tau)$  就是  $\hat{M}$  的零模解,  $N(\tau) = \frac{dx_c}{d\tau}$ 。式(5.4.41)决定了  $z(\tau)$  满足的边界条件为  $z(-T) = 0$ , 而  $z(T)$  要由式(5.4.41)的逆映射给出。从式(5.4.41)以及  $y(-T) = 0$ ,  $z(-T) = 0$  可以得出式(5.4.41)的逆映射<sup>[13]</sup>:

$$y(\tau) = z(\tau) + N(\tau) \int_{-T}^{\tau} \frac{\dot{N}(\tau')}{N^2(\tau')} z(\tau') d\tau' \quad (5.4.43)$$

式(5.4.43)给出

$$z(T) + N(T) \int_{-T}^T \frac{\dot{N}(\tau')}{N^2(\tau')} z(\tau') d\tau' = 0 \quad (5.4.44)$$

这是  $z(\tau)$  满足的第二个边界条件。映射(5.4.41)带来的简化是  $\delta^2 S_E$  变为<sup>①</sup>

$$\delta^2 S_E = \frac{1}{2} \int_{-T}^T \dot{z}^2(\tau) d\tau \quad (5.4.45)$$

作为代价, 它导致  $z(T)$  受到约束(式(5.4.44))。约束可以用拉格朗日不定乘子解决。将  $N(\tau)$  改写为  $\dot{x}_c(\tau)$ , 积分  $I$ (式(5.4.39))即可写为

① 见文献[15]附录 B。

$$I = \int [Dz] d\alpha \left| \frac{\partial y}{\partial z} \right| \exp \left[ - \int_{-T}^T d\tau \left\{ \frac{1}{2} \dot{z}^2 + \alpha \left( z(T) + \dot{x}_c(T) \int_{-T}^T \frac{\ddot{x}_c(\tau')}{\dot{x}_c^2(\tau')} z(\tau') d\tau' \right) \right\} \right] \quad (5.4.46)$$

此处  $\left| \frac{\partial y}{\partial z} \right|$  是映射的雅可比行列式, 指数上包含拉格朗日不定乘子  $\alpha$  的一项反映了  $z(T)$  受到的约束。经过繁复的积分, 可将  $I$  直接算出<sup>①</sup>, 最后的结果是

$$I = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [\dot{x}_c(-T)\dot{x}_c(T)]^{-1/2} \left[ \int_{-T}^T \frac{d\tau}{\dot{x}_c^2(T)} \right]^{-1/2} \quad (5.4.47)$$

这个结果给出了一个重要结论: 对扭折解,  $\dot{x}_c(-T) = \dot{x}_c(T)$ , 因此第一个括号内的因子为正, 对回弹解,  $\dot{x}_c(-T) = -\dot{x}_c(T)$ , 这个因子为负,  $I$  为虚数。文献[14]给出了倒双阱势  $I$  的数值。

### 5.4.3 谐振子前置因子的另一种算法

以下介绍文献[7]的算法。1+1 维欧氏时空谐振子的拉格朗日量是

$$L = \frac{1}{2} \left( \frac{dx}{d\tau} \right)^2 + \frac{1}{2} \omega^2 x^2 \quad (5.4.48)$$

势能部分:

$$V'' = \omega^2 \quad (5.4.49)$$

为常数。经典轨道方程是

$$- \frac{d^2 X}{d\tau^2} + \omega^2 X = 0$$

为了演示方法, 先计算一个简单情况: 对于任何  $\tau$  值,  $X(\tau) = 0$ 。经典谐振子在原点静止。经典作用量是

$$S_0 = 0$$

为了计算前置因子, 考虑  $x_n$  满足的方程:

$$\left( - \frac{d^2}{d\tau^2} + \omega^2 \right) x_n = \lambda_n x_n \quad (5.4.50)$$

边界条件是

$$x_n(-\tau_0/2) = 0, x_n(\tau_0/2) = 0$$

边界条件给出方程的本征值<sup>②</sup>:

① 见文献[15]附录 B。

② 方程(5.4.50)的解和相应的本征值是:

$$x_n(\tau) = \cos \sqrt{\lambda_n - \omega^2} \tau, \quad (\lambda_n - \omega^2)^{1/2} = (2n+1)\pi/\tau_0, n=0,1,2,3,\dots$$

$$x_n(\tau) = \sin \sqrt{\lambda_n - \omega^2} \tau, \quad (\lambda_n - \omega^2)^{1/2} = 2n\pi/\tau_0, n=1,2,3,\dots$$

本征值谱因而是

$$\lambda_n = \omega^2 + \frac{n^2 \pi^2}{\tau_0^2}, \quad n=1,2,3,\dots$$

$$\lambda_n = \omega^2 + \frac{n^2 \pi^2}{\tau_0^2} = \frac{n^2 \pi^2}{\tau_0^2} \left( 1 + \frac{\omega^2 \tau_0^2}{n^2 \pi^2} \right), n = 1, 2, \dots \quad (5.4.51)$$

以及

$$\prod_n \lambda_n^{-1/2} = \left( \prod_n \frac{n^2 \pi^2}{\tau_0^2} \right)^{-1/2} \left[ \prod_n \left( 1 + \frac{\omega^2 \tau_0^2}{n^2 \pi^2} \right) \right]^{-1/2}$$

上式右侧的两个因子可以分别计算。先考虑自由粒子(弹性常数为 0 的谐振子,  $\omega = 0$ ), 它的本征值是  $\lambda_n = \frac{n^2 \pi^2}{\tau_0^2}$ , 因此,

$$\left\langle 0 \left| \exp\left(-\frac{p^2}{2\hbar} \tau_0\right) \right| 0 \right\rangle = N \left( \prod_n \frac{n^2 \pi^2}{\tau_0^2} \right)^{-1/2}$$

上式的左侧可以直接计算。使用式(5.1.11), 并考虑到自由粒子的零点波函数是  $\psi_n(0) = 1$ , 可得

$$\begin{aligned} \left\langle 0 \left| \exp\left(-\frac{p^2}{2\hbar} \tau_0\right) \right| 0 \right\rangle &= \sum_n \exp\left(-\frac{p_n^2}{2\hbar} \tau_0\right) \psi_n(0) \psi_n^*(0) = \sum_n \exp\left(-\frac{p_n^2}{2\hbar} \tau_0\right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi} e^{p^2 \tau_0 / 2\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau_0/\hbar}} \end{aligned}$$

因此有

$$N \left( \prod_n \frac{n^2 \pi^2}{\tau_0^2} \right)^{-1/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\tau_0/\hbar}}$$

连乘式的第二个因子可以用公式<sup>①</sup>

$$\pi y \prod_n \left( 1 + \frac{y^2}{n^2} \right) = \sinh \pi y$$

给出。总结起来, 有

$$\left\langle 0 \left| e^{-\hat{H}\tau_0/\hbar} \right| 0 \right\rangle = \left( \frac{\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} (2\sinh\omega\tau_0)^{-1/2} \quad (5.4.52)$$

当  $\tau_0$  的取值较大时, 考虑到

$$(2\sinh\omega\tau_0)^{-1/2} = e^{\omega\tau_0/2} (1 - e^{-2\omega\tau_0})^{1/2} \approx e^{-\omega\tau_0/2} \left( 1 + \frac{1}{2} e^{-2\omega\tau_0} + \dots \right)$$

就有

$$\lim \sum_n \exp\left(-\frac{E_n}{\hbar} \tau_0\right) |\langle 0 | n \rangle|^2 = \left( \frac{\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} e^{-\omega\tau_0/2} \left( 1 + \frac{1}{2} e^{-2\omega\tau_0} + \dots \right) \quad (5.4.53)$$

比较式(5.4.53)和式(5.1.11)两式的右侧, 就得到最低的两个偶数态( $n=0, 2$ )的本征值和零点波函数:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}, \psi_0^2(0) = \left( \frac{\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/2} \quad (5.4.54)$$

$$E_2 = \frac{5\hbar\omega_0}{2}, \psi_2^2(0) = \frac{1}{2} \left( \frac{\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/2} \quad (5.4.55)$$

<sup>①</sup> 见 I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik. Tables of Integrals, Series and Products. Academic, 1968。这个等式可以从一个有趣的角理解。左侧可以看作无限大阶的多项式, 零点在  $\pm in/\pi, n=0, 1, 2, \dots$  右侧零点也在这些点上。双方在有限的复平面上都是解析函数, 因此彼此相等。

由于我们计算的是特殊情况  $x_i = x_f = 0$ , 奇宇称态不会出现。

## 参考文献

- [1] FEYNMAN R P. Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics[J]. Review of Modern Physics, 1948, 20: 367-387.
- [2] FEYNMAN R P, HIBBS A R. Quantum mechanics and path integrals[M]. New York: McGraw-Hill, 1965.
- [3] FEYNMAN R P. Statistical mechanics: A set of lectures[M]. Massachusetts: W. A. Benjamin, 1972.
- [4] SWANSON M S. Path integrals and quantum processes[M]. Boston: Academic Press, 1992.
- [5] KLEINERT H. Path integrals in quantum mechanics, statistics and polymer science[M]. Singapore: World Scientific, 1990.
- [6] COLEMAN S. The uses of instantons[M]//ZICHICHI A. The whys of subnuclear physics. New York: Plenum Press, 1979.
- [7] VAĪNSHTEĪN A I, ZAKHAROV V I, NOVIKOV V A, et al. ABC of instantons[J]. Soviet Physics Uspekhi, 1982, 25(4): 195-215.
- [8] CALLAN C G, COLEMAN S. Fate of the false vacuum. II. First quantum corrections[J]. Physical Review D, 1977, 16: 1762-1768.
- [9] LANGER J. Theory of the condensation point[J]. Annals of Physics, 1967, 41(1): 108-157.
- [10] FADDEEV L, POPOV V. Feynman diagrams for the Yang-Mills field[J]. Physics Letters B, 1967, 25(1): 29-30.
- [11] CALDEIRA A, LEGGETT A. Quantum tunnelling in a dissipative system[J]. Annals of Physics, 1983, 149(2): 374-456.
- [12] LANDAU L D, LIFSHITZ E M. Quantum mechanics: Non-relativistic theory[M]. 3rd edition. Oxford: Pergamon Press, 1977.
- [13] DASHEN R F, HASSLACHER B, NEVEU A. Semiclassical bound states in an asymptotically free theory[J]. Physical Review D, 1975, 12: 2443-2458.
- [14] LIANG J Q, MÜLLER-KIRSTEN H J W. Periodic instantons and quantum-mechanical tunneling at high energy[J]. Physical Review D, 1992, 46: 4685-4690.
- [15] LIANG J Q, MÜLLER-KIRSTEN H J W. Nonvacuum bounces and quantum tunneling at finite energy[J]. Physical Review D, 1994, 50: 6519-6530.