Pauli 矩阵与二能级自旋

Pauli Matrices, Bloch Sphere and Stern--Gerlach Experiments

从矩阵代数到算符, 几何表示与实验实现

RongYu

量子力学系列讲义

2026.8.5

目录

导言 4

I Pauli 矩阵与矩阵代数 5

1 从 Pauli 矩阵到二能级系统 6
1.1 三个 Pauli 矩阵 . . . 6
1.2 统一表达式 . . . 6
1.3 为什么关心这些矩阵 . . . 6

2 Pauli 矩阵的代数 7
2.1 对易关系 . . . 7
2.2 反对易关系 . . . 7
2.3 乘法公式 . . . 8
2.4 迹, 行列式与正交性 . . . 8

3 Pauli 矢量恒等式 10
3.1 Pauli 矢量算符 . . . 10
3.2 矢量恒等式 . . . 10
3.3 单位矢量情形 . . . 11

4 电磁场中的动力学动量 12
4.1 动力学动量与它的非对易性 . . . 12
4.2 分量叉积的对易关系 . . . 12
4.3 Pauli 矢量恒等式的应用 . . . 13

II Pauli 基, 密度矩阵与指数算符 14

5 Pauli 基与 $M_2(\mathbb{C})$ 15
5.1 任意二阶矩阵的 Pauli 展开 . . . 15
5.2 厄米与反厄米条件 . . . 15

6 二能级系统的密度矩阵 17
6.1 密度矩阵的 Bloch 展开 . . . 17

7 SU(2) 与 Pauli 指数 **18**
7.1 SU(2) 的参数化 18
7.2 Pauli 指数的闭式表达 18
7.3 自旋旋转算符与半角结构 19

III Pauli 算符与表象 **21**

8 Pauli 算符与表象 **22**
8.1 矩阵与算符 22
8.2 厄米, 幺正, 对合三性 22

9 $\hat{\sigma}_3$ 表象, 谱分解与升降算符 **24**
9.1 $\hat{\sigma}_3$ 的本征值问题与表象 24
9.2 $\hat{\sigma}_3$ 的谱分解 24
9.3 升降算符 25

10 $\hat{\sigma}_1$ 与 $\hat{\sigma}_2$ 的本征态 **26**
10.1 $\hat{\sigma}_1$ 的本征态 26
10.2 $\hat{\sigma}_2$ 的本征态 26

11 任意方向的 Pauli 算符 **28**
11.1 方向矢量与算符的矩阵形式 28
11.2 本征值与本征态 29
11.3 投影算符 30

IV Bloch 球 **31**

12 Bloch 球 **32**
12.1 纯态的参数化 32
12.2 六个特殊态 32
12.3 纯态的密度矩阵 33
12.4 混合态与 Bloch 球内部 34
12.5 Bloch 矢量与期望值 34

V 自旋 1/2 与 Stern–Gerlach 实验 **36**

13 Pauli 算符与自旋 1/2 **37**

14 Stern–Gerlach 实验 **38**

14.1 装置的基本思想 38

14.2 测量装置与态制备装置 39

14.3 同方向的连续测量 39

14.4 先测 $\hat{\sigma}_3$ 再测 $\hat{\sigma}_1$ 40

14.5 中间测量破坏原先确定的分量 41

14.6 任意两个方向的测量概率 42

14.7 不同方向算符的对易关系 43

15 本章总结 **45**

A 核心公式速查 **46**

B 符号与物理意义对照表 **47**

C 练习 **48**

C.1 练习提示 48

导言

本讲从前一章末出现的 Pauli 矩阵接续, 一直推进到 Stern–Gerlach 实验. 与前面的一般测量理论不同, 这里的舞台是二维 Hilbert 空间 $\mathscr{H}_2 \simeq \mathbb{C}^2$: 二能级系统是量子理论中最小的非平凡系统, 而 Pauli 矩阵恰好为它提供了完整的算符语言. 全章的主线可以压缩为五个环节

$$\text{矩阵代数} \longrightarrow \text{抽象算符} \longrightarrow \text{本征态与投影} \longrightarrow \text{Bloch 几何} \longrightarrow \text{Stern–Gerlach 实验}.$$

Pauli 矩阵先作为 2×2 复矩阵引入, 其乘法, 对易与反对易关系构成一个封闭的代数; 随后把这些矩阵解释为作用于 $\mathscr{H}_2$ 上的抽象算符, 本征值刻画测量结果, 投影算符把测量和态制备联系起来; Bloch 球再把上述抽象结构映射为三维单位球面上的几何对象; 最后, Stern–Gerlach 实验用不均匀磁场把本征值 $\pm\hbar/2$ 具体地实现出来. 图 1 给出这条逻辑地图, 每一节的推导都会回到它.

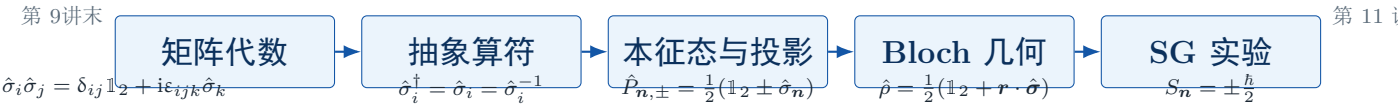


图 1: 全章逻辑主线. 五个环节依次推进: 矩阵代数提供计算结构, 抽象算符描述可观测量, 本征态与投影连接状态和测量, Bloch 球给出几何表示, Stern–Gerlach 实验把本征值 $\pm\hbar/2$ 具体实现出来.

本讲采用统一的记号, 并且全章不再更改. 坐标方向用 $(1,2,3)$ 编号, 因此三个 Pauli 算符写作 $\hat\sigma_1,\hat\sigma_2,\hat\sigma_3$; 普通三维矢量一律用粗斜体, 如 $\boldsymbol n, \boldsymbol A, \boldsymbol B$; 量子力学算符一律戴帽; 虚数单位与自然常数分别记作 i 与 e, Kronecker 符号与 Levi–Civita 符号写作 δ_{ij} 与 ε_{ijk}. 二维 Hilbert 空间中的单位算符记作 $\mathbb{1}_2$. 在 $\hat\sigma_3$ 方向, 两个本征态记作 $|0\rangle, |1\rangle$; 在任意方向 $\boldsymbol n$, 两个本征态记作 $|\sigma_{\boldsymbol n};+\rangle$ 与 $|\sigma_{\boldsymbol n};-\rangle$. 这些记号在后面用到时都会再次说明.

整个讲义由五个部分构成: 第一部分建立 Pauli 矩阵及其代数; 第二部分把矩阵推广为 $M_2(\mathbb{C})$ 的基底, 引入密度矩阵的 Pauli 展开与指数算符; 第三部分把矩阵解释为算符, 建立 $\hat\sigma_3$ 表象, 求解任意方向的 Pauli 算符; 第四部分给出 Bloch 球的几何; 第五部分把以上结构应用到自旋 1/2 与 Stern–Gerlach 实验.

Part I

Pauli 矩阵与矩阵代数

本部分从三个 Pauli 矩阵出发, 建立它们的乘法代数, 导出迹与行列式关系, 证明 Pauli 矢量恒等式, 并用电磁场中的动力学动量作为第一个应用. 这一部分只处理矩阵与普通三维向量, 是后续所有内容的基础.

内容概要

- 给出三个 Pauli 矩阵及其统一表达式, 理解 Kronecker 符号的作用.
- 完整推导对易, 反对易与乘法公式, 掌握 Levi–Civita 符号的方向性.
- 掌握 Pauli 矢量恒等式 $(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{A})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B})$ 与 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}^2=\mathbb{1}_2$.
- 理解动力学动量分量不对易如何产生与 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}$ 耦合的项.

1

从 Pauli 矩阵到二能级系统

1.1 三个 Pauli 矩阵

三个 Pauli 矩阵定义为

Def. 1　三个 Pauli 矩阵

$$\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

再引入二维单位矩阵

$$\hat{\sigma}_0 = \mathbb{1}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

它们的下标 $1,2,3$ 对应空间三个坐标方向 x_1, x_2, x_3, 不是矩阵元指标.

三个矩阵中的每一个都只有一对非零矩阵元. $\hat{\sigma}_1$ 交换两个基矢, $\hat{\sigma}_2$ 在交换的同时改变相位, $\hat{\sigma}_3$ 则对两个基矢分别取相反的本征值. 后面会看到, 这种分工正是它们作为完整算符基底的原因.

1.2 统一表达式

三个 Pauli 矩阵可以压缩为一个统一表达式

$$\hat{\sigma}_i = \begin{pmatrix} \delta_{i3} & \delta_{i1} - \mathrm{i}\delta_{i2} \\ \delta_{i1} + \mathrm{i}\delta_{i2} & -\delta_{i3} \end{pmatrix}, \qquad i = 1,2,3. \tag{1.1}$$

Kronecker 符号 δ_{ij} 在 $i = j$ 时取 1, 否则取 0, 它在矩阵元的位置上挑出下标 i 与行或列指标相同的项. 例如取 $i = 1$, 则 $\delta_{13} = \delta_{12} = 0$ 而 $\delta_{11} = 1$, 右上与左下矩阵元都是 1, 其余为 0, 恰好回到 $\hat{\sigma}_1$; 取 $i = 2$ 时右上角为 $-\mathrm{i}$, 左下角为 $+\mathrm{i}$, 回到 $\hat{\sigma}_2$; 取 $i = 3$ 时回到对角矩阵 $\mathrm{diag}(1,-1)$. 因而式(1.1) 用一条公式同时记录了三个矩阵, 它也表明三个 Pauli 矩阵只有两个独立的实参数: 一个实对角元素和一个复非对角元素.

1.3 为什么关心这些矩阵

这些矩阵并非随手挑选的 2×2 矩阵. 它们同时承担两种角色: 一方面, $\{\hat{\sigma}_0, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3\}$ 构成全部 2×2 复矩阵空间 $M_2(\mathbb{C})$ 的一组自然基 (第二部分会证明); 另一方面, 任何二能级系统的可观测量都可以写成它们的实线性组合, 自旋 $1/2$ 的角动量算符直接正比于 $\hat{\sigma}_i$. 因此理解了这三个矩阵的代数, 就同时理解了矩阵表示, 自旋 $1/2$ 以及一般的二能级系统.

2

Pauli 矩阵的代数

2.1 对易关系

Pauli 矩阵满足对易关系

$$[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k, \tag{2.1}$$

其中对重复指标 k 求和, ε_{ijk} 是完全反对称的 Levi–Civita 符号: $\varepsilon_{123} = 1$, 交换任意两个指标改变符号, 有两个指标相同时为零. 式(2.1) 说明三个 Pauli 矩阵互相不对易: 它们的代数不是平凡的交换代数.

先显式计算一组, 例如

Eg. 1 $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2$ 与 $\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1$

直接做矩阵乘法,

$$\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} \end{pmatrix} = \mathrm{i}\hat{\sigma}_3,$$

$$\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\mathrm{i} & 0 \\ 0 & \mathrm{i} \end{pmatrix} = -\mathrm{i}\hat{\sigma}_3.$$

两式相减即得 $[\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2] = 2\mathrm{i}\hat{\sigma}_3$.

循环置换下标 $(1,2,3) \to (2,3,1) \to (3,1,2)$ 保持 Levi–Civita 符号的符号不变, 因此

$$[\hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3] = 2\mathrm{i}\hat{\sigma}_1, \qquad [\hat{\sigma}_3, \hat{\sigma}_1] = 2\mathrm{i}\hat{\sigma}_2.$$

而逆序置换改变符号, 例如 $[\hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_1] = -[\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2]$. 三个对易关系只需记住一个, 其余由循环置换得到.

2.2 反对易关系

Pauli 矩阵同时满足反对易关系

$$\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}\hat{\sigma}_0. \tag{2.2}$$

当 $i = j$ 时式(2.2) 给出

$$\hat{\sigma}_i^2 = \hat{\sigma}_0 = \mathbb{1}_2,$$

即每个 Pauli 矩阵的平方是单位矩阵; 当 $i \neq j$ 时给出

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = -\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_i,$$

即不同下标的两矩阵互相反对易. 于是同一下标对应单位矩阵, 不同下标对应符号的交换, 这正是式(2.2) 用 δ_{ij} 同时记录两种情形的含义.

2.3 乘法公式

把对易关系式(2.1) 与反对易关系式(2.2) 合并. 任意两个算符的乘积都可以拆成对称部分与反对称部分,

$$\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \frac{1}{2}\{\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j\} + \frac{1}{2}[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j],$$

代入上面两组关系得到最重要的乘法公式

Prop. 1 Pauli 乘法公式

$$\boxed{\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \delta_{ij} \mathbb{1}_2 + \mathrm{i} \varepsilon_{ijk} \hat{\sigma}_k}.$$

这一条公式同时包含两种信息: $i = j$ 时, 第二项因 $\varepsilon_{iik} = 0$ 而消失, 只剩下 $\hat{\sigma}_i^2 = \mathbb{1}_2$; $i \neq j$ 时, 第一项消失, 剩下 $\hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j = \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$, 其符号由 (i, j, k) 是否为 $1, 2, 3$ 的循环置换决定. 图 2 用三角循环表示这种方向性.

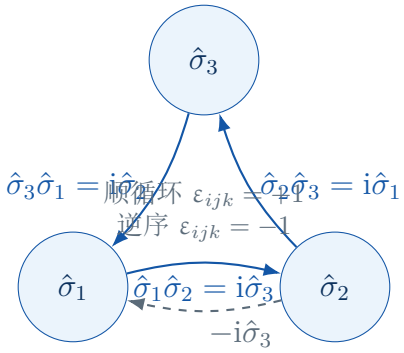


图 2: Pauli 矩阵的循环代数. 沿 $\hat{\sigma}_1 \to \hat{\sigma}_2 \to \hat{\sigma}_3 \to \hat{\sigma}_1$ 的顺循环, 相邻乘积给出 $+\mathrm{i}\hat{\sigma}_k$; 逆序给出负号. 图中虚线箭头示意 $\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_1 = -\mathrm{i}\hat{\sigma}_3$. 这正是 Levi–Civita 符号的方向性.

顺循环方向的乘法次序在式(2.1) 中表现为 $\varepsilon_{ijk} = +1$, 逆序则取 -1. 因此图 2 不只是帮助记忆三个关系, 它直接刻画了 Levi–Civita 符号: 顺时针读下标是循环置换, 逆时针则改变符号. 这条几何直觉在任意方向的 Pauli 算符对易关系中还会再次出现.

2.4 迹, 行列式与正交性

由矩阵直接看出每个 Pauli 矩阵无迹, 再结合乘法公式可以得到一组迹关系

$$\operatorname{Tr}\hat{\sigma}_i = 0, \qquad \operatorname{Tr}(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j) = 2\delta_{ij}, \qquad \operatorname{Tr}(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_k) = 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}, \tag{2.3}$$

以及行列式

$$\det\hat{\sigma}_i = -1.$$

迹关系式(2.3) 的第二条是后面一切展开公式的根源. 它说明在迹内积

$$\langle \hat{A}, \hat{B}\rangle = \operatorname{Tr}\left(\hat{A}^\dagger\hat{B}\right)$$

下, 三个 Pauli 矩阵彼此正交, 并且每个矩阵的范数平方为 $\operatorname{Tr}(\hat{\sigma}_i^2) = 2$. 加入 $\hat{\sigma}_0$ 之后, $\{\hat{\sigma}_0, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3\}$ 就构成 $M_2(\mathbb{C})$ 的一组正交基, 这正是下一部分要利用的事实.

3

Pauli 矢量恒等式

3.1 Pauli 矢量算符

把三个 Pauli 算符组合成一个矢量算符

Def. 1 Pauli 矢量

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{e}_1\hat{\sigma}_1 + \boldsymbol{e}_2\hat{\sigma}_2 + \boldsymbol{e}_3\hat{\sigma}_3}.$$

这里 $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$ 是普通三维空间中的正交单位基矢. 需要注意, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 的三个" 分量" $\hat{\sigma}_i$ 是作用在二维 Hilbert 空间 $\mathscr{H}_2$ 上的算符, 而基矢 $\boldsymbol{e}_i$ 是普通三维空间中的向量. 因此 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 的每一条分量都横跨两个空间: 指标 i 属于三维矢量空间, 算符 $\hat{\sigma}_i$ 属于 $\mathscr{H}_2$ 上的算符空间. 把两者清晰分开, 是理解 Pauli 矢量恒等式的前提.

3.2 矢量恒等式

对任意两个普通三维矢量 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$, 定义

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{A} = \sum_i A_i \hat{\sigma}_i,$$

利用乘法公式展开乘积:

$$\begin{aligned}(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{A})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{B}) &= A_i B_j \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \\ &= A_i B_j \left(\delta_{ij}\mathbb{1}_2 + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k\right) \\ &= A_i B_i\, \mathbb{1}_2 + \mathrm{i} A_i B_j \varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k.\end{aligned} \tag{3.1}$$

第一项中 $A_iB_i = \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}$ 正是普通三维点积; 第二项中 $A_iB_j\varepsilon_{ijk}$ 正是叉积第 k 个分量的定义 $(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})_k$. 因此式(3.1) 可以改写成

Prop. 1 Pauli 矢量恒等式

$$\boxed{(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{A})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B})\mathbb{1}_2 + \mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})}.$$

这是第一部分最重要的公式. 它的左边是两个 2×2 矩阵的乘积, 右边是一个标量倍的单位矩阵加上另一个 2×2 矩阵. 换句话说, 普通三维空间中的点积与叉积完全决定了二维算符的乘积结构: 三个 Pauli 算符之间的乘法关系被重新翻译成了三维矢量运算. 这也解释了为什么二能级系统的代数如此简单 – 它由三维矢量的运算完全控制.

3.3 单位矢量情形

在恒等式中取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=\boldsymbol{n}$, 其中 $\boldsymbol{n}$ 是单位矢量. 此时 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{n}=1$ 且 $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{n}=\boldsymbol{0}$, 于是

$$\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}^{2}=(\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^{2}=\mathbb{1}_{2}. \tag{3.2}$$

这里定义了沿任意方向 $\boldsymbol{n}$ 的 Pauli 算符 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}=\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, 它是后面第三部分的核心对象. 式(3.2)表明无论方向如何, 平方都是单位矩阵. 由此立即得到幂次规律

$$\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}^{2m}=\mathbb{1}_{2},\qquad \hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}^{2m+1}=\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}},\qquad m=0,1,2,\ldots$$

偶数次幂回到单位矩阵, 奇数次幂回到算符本身. 这条规律把任意解析函数在 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 上的取值简化为单位矩阵与 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 的线性组合, 是第二部分指数展开的基础. 同时, 从 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}^{2}=\mathbb{1}_{2}$ 还能直接读出本征值只能取 ±1, 这是第三部分将要证明的内容.

4

电磁场中的动力学动量

4.1 动力学动量与它的非对易性

课堂用 Pauli 矢量恒等式处理带电粒子在电磁场中的动力学动量

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\boldsymbol{p}} - \frac{q}{c}\boldsymbol{A}, \tag{4.1}$$

其中 q 是电荷, c 是光速, $\hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla}$ 是正则动量算符, $\boldsymbol{A}$ 是矢势. 直接套用矢量恒等式时, 形式上可以写出

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{\pi}})^2 = \hat{\boldsymbol{\pi}}^2 + \mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\hat{\boldsymbol{\pi}}\times\hat{\boldsymbol{\pi}}).$$

现在的问题在于第二项: 这里的 $\hat{\boldsymbol{\pi}}$ 是算符, 它的不同分量一般不对易, 因此**不能**令 $\hat{\boldsymbol{\pi}}\times\hat{\boldsymbol{\pi}} = \boldsymbol{0}$. 这正是矢量恒等式中" 普通三维矢量" 与" 矢量算符" 的区别所在: 对普通矢量, 叉积自己与自己必为零; 对算符, 只有各分量对易时才为零.

4.2 分量叉积的对易关系

先展开叉积的第 i 个分量

$$(\hat{\boldsymbol{\pi}}\times\hat{\boldsymbol{\pi}})_i = \varepsilon_{ijk}\hat{\pi}_j\hat{\pi}_k. \tag{4.2}$$

由于 ε_{ijk} 关于 j,k 反对称, 可以对 j,k 对称化:

$$\varepsilon_{ijk}\hat{\pi}_j\hat{\pi}_k = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}(\hat{\pi}_j\hat{\pi}_k - \hat{\pi}_k\hat{\pi}_j) = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}[\hat{\pi}_j,\hat{\pi}_k].$$

因此关键是求 $[\hat{\pi}_j,\hat{\pi}_k]$. 把式(4.1) 代入,

$$\begin{aligned}[\hat{\pi}_j,\hat{\pi}_k] &= \left[\hat{p}_j - \frac{q}{c}A_j, \hat{p}_k - \frac{q}{c}A_k\right] \\ &= -\frac{q}{c}[\hat{p}_j, A_k] - \frac{q}{c}[A_j,\hat{p}_k].\end{aligned} \tag{4.3}$$

这里 $[\hat{p}_j,\hat{p}_k] = 0$ 与 $[A_j,A_k] = 0$, 而动量与位置函数之间的对易关系为

$$[\hat{p}_j, A_k] = -\mathrm{i}\hbar\partial_j A_k, \qquad [A_j,\hat{p}_k] = \mathrm{i}\hbar\partial_k A_j.$$

代入式(4.3) 得到

$$[\hat{\pi}_j, \hat{\pi}_k] = \frac{\mathrm{i}q\hbar}{c}\big(\partial_j A_k - \partial_k A_j\big). \tag{4.4}$$

括号里的量正是磁场的 i 分量与 Levi–Civita 符号的缩并: 记 $B_i = \varepsilon_{ijk}\partial_j A_k$, 则式(4.4) 结合式(4.2) 给出

$$(\hat{\boldsymbol{\pi}} \times \hat{\boldsymbol{\pi}})_i = \frac{1}{2}\varepsilon_{ijk}\frac{\mathrm{i}q\hbar}{c}\big(\partial_j A_k - \partial_k A_j\big) = \frac{\mathrm{i}q\hbar}{c}B_i.$$

于是叉积的矢量形式为

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} \times \hat{\boldsymbol{\pi}} = \frac{\mathrm{i}q\hbar}{c}\boldsymbol{B},$$

它不再为零,而是正比于磁场.

4.3 Pauli 矢量恒等式的应用

把上述结果代回最初的展开,

$$\mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\hat{\boldsymbol{\pi}} \times \hat{\boldsymbol{\pi}}) = \mathrm{i}\,\frac{\mathrm{i}q\hbar}{c}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B} = -\frac{q\hbar}{c}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B},$$

最终得到

Prop. 1　动力学动量平方的分解

$$\boxed{(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\hat{\boldsymbol{\pi}})^2 = \hat{\boldsymbol{\pi}}^2 - \frac{q\hbar}{c}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}}.$$

式(4.1) 中 $\hat{\boldsymbol{\pi}}^2$ 是动力学动量的动能项, 而 $-\frac{q\hbar}{c}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}$ 是一个新出现的耦合项: 它正比于磁场, 并与 Pauli 算符点乘. 也就是说, 带电粒子的动力学动量各分量并不对易, 这种非对易性在平方展开时必然产生一个与磁场和自旋耦合的额外项. 这个 $\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}$ 项正是泡利方程中自旋与磁场相互作用的来源, 它不需要人为引入, 而是从动力学动量的定义(4.1) 直接推导出来的.

Part II

Pauli 基, 密度矩阵与指数算符

本部分把第一部分的矩阵代数提升为二阶矩阵空间的基底理论: 任意 2×2 复矩阵都能在 Pauli 基下唯一展开, 厄米与反厄米条件分别对应实系数与纯虚系数; 密度矩阵的归一化条件给出 Bloch 展开; 幺正矩阵条件则给出 SU(2) 的参数化与指数公式.

内容概要

- 证明 $\{\hat{\sigma}_0, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3\}$ 构成 $M_2(\mathbb{C})$ 的基底, 掌握展开系数公式.
- 由迹归一化推导密度矩阵的 Bloch 展开 $\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\mathbb{1}_2 + \boldsymbol{r} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})$.
- 理解 SU(2) 的参数化约束, 推导 Pauli 指数公式与自旋旋转算符的半角结构.

5

Pauli 基与 $M_2(\mathbb{C})$

5.1 任意二阶矩阵的 Pauli 展开

第一部分已经证明 $\{\hat\sigma_0,\hat\sigma_1,\hat\sigma_2,\hat\sigma_3\}$ 在迹内积下两两正交. 由于 $M_2(\mathbb{C})$ 作为复向量空间是四维的, 这四个彼此正交的算符恰好构成一组基底:

Prop. 1　Pauli 分解

每个线性算符 $\hat A\in M_2(\mathbb{C})$ 都能唯一展开为

$$\boxed{\hat A=\sum_{\mu=0}^{3}a_\mu\hat\sigma_\mu},$$

其中 $\hat\sigma_0=\mathbb{1}_2$, 展开系数由迹正交性给出

$$\boxed{a_\mu=\frac{1}{2}\operatorname{Tr}\big(\hat\sigma_\mu\hat A\big)}.$$

Pf　唯一性由基底的正交性保证. 展开系数可以从对两边取迹得到: 对 $\mu=0$, $\operatorname{Tr}\big(\hat A\big)=a_0\operatorname{Tr}\hat\sigma_0=2a_0$, 所以 $a_0=\frac12\operatorname{Tr}\hat A$. 对 $\mu=i$, 先左乘 $\hat\sigma_i$ 再取迹,

$$\operatorname{Tr}\big(\hat\sigma_i\hat A\big)=\sum_\mu a_\mu\operatorname{Tr}(\hat\sigma_i\hat\sigma_\mu)=a_0\operatorname{Tr}\hat\sigma_i+a_j\operatorname{Tr}(\hat\sigma_i\hat\sigma_j)=2a_i,$$

中间用到 $\operatorname{Tr}\hat\sigma_i=0$ 与 $\operatorname{Tr}(\hat\sigma_i\hat\sigma_j)=2\delta_{ij}$, 于是 $a_i=\frac12\operatorname{Tr}\big(\hat\sigma_i\hat A\big)$. 这就证明了系数公式. □

Pauli 分解的意义在于: 任何二阶算符的计算都可以归结为四个系数与三个基矢的运算. 这与第一部分末的结论一致 – 二能级系统的全部算符结构都由少量实数, 向量和叉积控制.

5.2 厄米与反厄米条件

分解式还直接把厄米性翻译成系数的实性. 因为 $\hat\sigma_\mu^\dagger=\hat\sigma_\mu$, 取厄米共轭得

$$\hat A^\dagger=\sum_\mu a_\mu^*\hat\sigma_\mu,$$

由展开的唯一性, $\hat A^\dagger=\hat A$ 当且仅当 $a_\mu^*=a_\mu$. 因此

Prop. 2　厄米与反厄米算符

若 $\hat{A} = \sum_\mu a_\mu \hat{\sigma}_\mu$ 是厄米算符, 则全部 a_μ 为实数; 若 $\hat{A}$ 是反厄米算符 (即 $\hat{A}^\dagger = -\hat{A}$), 则全部 a_μ 为纯虚数.

特别地, 一般的厄米算符可以写成

$$\hat{H} = a\,\mathbb{1}_2 + \boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \qquad a \in \mathbb{R}, \quad \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^3,$$

反厄米算符写成

$$\hat{S} = \mathrm{i}\big(a\,\mathbb{1}_2 + \boldsymbol{b}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\big),$$

而任意算符都能唯一分解为厄米部分与反厄米部分之和

$$\hat{A} = \frac{\hat{A} + \hat{A}^\dagger}{2} + \frac{\hat{A} - \hat{A}^\dagger}{2}.$$

这些结果在密度矩阵的处理中会直接用到: 密度算符是厄米算符, 因此它的 Pauli 系数必须是实数.

6

二能级系统的密度矩阵

6.1 密度矩阵的 Bloch 展开

对二能级系统, Hilbert 空间是 $\mathscr{H} = \mathbb{C}^2$, 密度矩阵 $\hat{\rho}$ 是满足 $\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}$, $\hat{\rho} \geq 0$, $\operatorname{Tr}\hat{\rho} = 1$ 的 2×2 矩阵. 由 Pauli 分解, $\hat{\rho}$ 可以展开为

$$\hat{\rho} = a\hat{\sigma}_0 + \boldsymbol{b} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}},$$

其中系数由上一节的知识应为实数. 归一化条件给出

$$\operatorname{Tr}\hat{\rho} = a \operatorname{Tr}\hat{\sigma}_0 + \boldsymbol{b} \cdot \operatorname{Tr}\hat{\boldsymbol{\sigma}} = 2a = 1,$$

这里用到 $\operatorname{Tr}\hat{\sigma}_0 = 2$ 与 $\operatorname{Tr}\hat{\sigma}_i = 0$. 因而 $a = \frac{1}{2}$. 令 $\boldsymbol{r} = 2\boldsymbol{b}$, 得到

Prop. 1 密度矩阵的 Bloch 展开

$$\boxed{\hat{\rho} = \frac{1}{2}\left(\mathbb{1}_2 + \boldsymbol{r} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}\right).}$$

这里的 $\boldsymbol{r}$ 是一个三维实矢量. 本部分先把它当作展开系数引入; 它的几何意义 – 作为 Bloch 矢量, 给出状态在 Bloch 球上的位置 – 将在第四部分讨论. 目前只需要记住: 密度矩阵的正规化自动消掉了 $\hat{\sigma}_0$ 前面的系数, 只剩一个三维矢量 $\boldsymbol{r}$ 的自由度.

7

SU(2) 与 Pauli 指数

7.1 SU(2) 的参数化

特殊二阶酉群定义为

$$SU(2) = \Big\{ U \in M_2(\mathbb{C}) \;\Big|\; U^\dagger U = \mathbb{1}_2,\ \det U = 1 \Big\}.$$

由 Pauli 分解, 任意 2×2 矩阵可写成 $a_0\mathbb{1}_2 + \mathrm{i}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 的形式 (取 i 是为了让系数为实数). 考察酉条件: 若记

$$U = a_0\hat{\sigma}_0 + \mathrm{i}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \qquad a_0 \in \mathbb{R}, \quad \boldsymbol{a} \in \mathbb{R}^3,$$

则

$$U^\dagger = a_0\hat{\sigma}_0 - \mathrm{i}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}},$$

于是

$$\begin{aligned} U^\dagger U &= \big(a_0\mathbb{1}_2 - \mathrm{i}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\big)\big(a_0\mathbb{1}_2 + \mathrm{i}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\big) \\ &= a_0^2\mathbb{1}_2 + (\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 \\ &= \big(a_0^2 + \boldsymbol{a}^2\big)\mathbb{1}_2, \end{aligned} \tag{7.1}$$

其中两个交叉项相互抵消, 第二行到第三行用到平方公式 $(\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 = \boldsymbol{a}^2\mathbb{1}_2$. 因此 $U^\dagger U = \mathbb{1}_2$ 等价于约束

$$a_0^2 + \boldsymbol{a}^2 = 1, \tag{7.2}$$

它说明 $SU(2)$ 的矩阵等价于四维实单位球面 $S^3 \subset \mathbb{R}^4$ 上的点. 加上 $\det U = 1$ 后, U 正是 $a_0, \boldsymbol{a}$ 构成的单位四元数. 这个结构在后面讨论指数公式时会自然出现.

7.2 Pauli 指数的闭式表达

对任意方向 $\boldsymbol{n}$ 的 Pauli 算符, 由于 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}^2 = \mathbb{1}_2$, 偶数次幂和奇数次幂已经由第一部分给出. 把指数函数按 Taylor 级数展开并按奇偶分组:

$$
\begin{aligned}
\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\mathrm{i}\theta\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}})^k}{k!} \\
&= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m\theta^{2m}}{(2m)!}\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}^{2m} + \mathrm{i}\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m\theta^{2m+1}}{(2m+1)!}\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}^{2m+1} \\
&= \Big(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m\theta^{2m}}{(2m)!}\Big)\mathbb{1}_2 + \mathrm{i}\Big(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m\theta^{2m+1}}{(2m+1)!}\Big)\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}.
\end{aligned}
\tag{7.3}
$$

两个括号分别是 $\cos\theta$ 与 $\sin\theta$ 的级数. 于是

Prop. 1 Pauli 指数公式

$$\boxed{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}} = \cos\theta\,\mathbb{1}_2 + \mathrm{i}\sin\theta\,\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}}.$$

这一闭式公式把指数算符约化为单位矩阵与 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 的线性组合, 是式(3.2) 的直接后果. 类似地,

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}} = \cos\theta\,\mathbb{1}_2 - \mathrm{i}\sin\theta\,\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}.$$

7.3 自旋旋转算符与半角结构

对于自旋 1/2 的空间旋转, 旋转算符习惯上写成

$$\hat{U}(\boldsymbol{n},\alpha) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}}.$$

利用指数公式立即得到

$$\hat{U}(\boldsymbol{n},\alpha) = \cos\frac{\alpha}{2}\,\mathbb{1}_2 - \mathrm{i}\sin\frac{\alpha}{2}\,\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}. \tag{7.4}$$

这里 α 是三维空间中的旋转角, 而指数中出现的是 $\alpha/2$. 图 3 展示了这一半角结构.

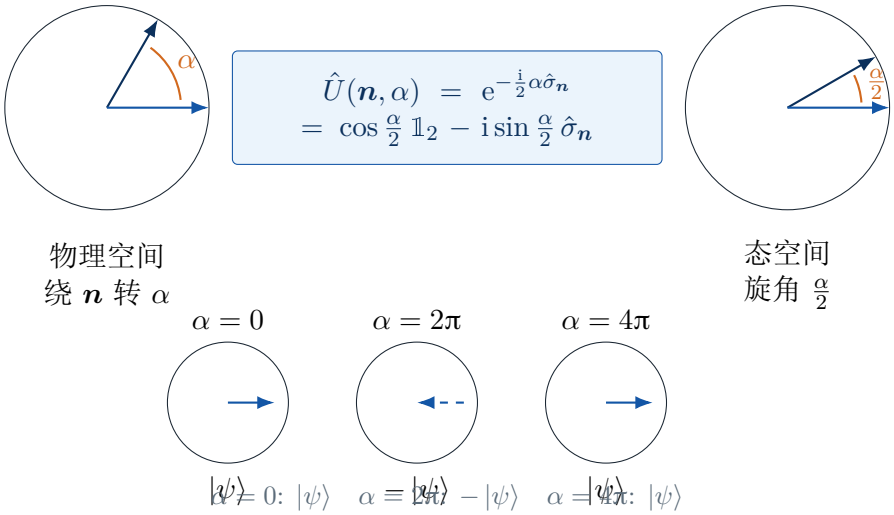


图 3: 自旋 1/2 旋转算符的半角结构. 物理空间绕 $\boldsymbol{n}$ 旋转角 α, 在态空间对应旋角 $\alpha/2$. 因此绕整圈 $\alpha = 2\pi$ 时, 态矢变为 $-|\psi\rangle$ (整体相位变号, 图中虚线反向箭头), 绕两圈 $\alpha = 4\pi$ 才回到 $|\psi\rangle$.

半角 $\alpha/2$ 是自旋 1/2 表示的核心特征, 也是图 3 底部所示 2π 与 4π 区别的来源: 物理上绕轴转一整圈不改变任何可观测效果, 但波函数已经获得一个负的整体相位. 这一现象正是自旋在旋转下按二值表示 $SU(2)$ 变换的体现. 这里只需把它作为式(7.4) 的直接推论, 不展开成一般群表示理论.

Part III

Pauli 算符与表象

本部分把 Pauli 矩阵解释为作用于二维 Hilbert 空间 $\mathscr{H}_2$ 的抽象算符, 建立 $\hat{\sigma}_3$ 表象, 完成谱分解与升降算符, 求解 $\hat{\sigma}_1$ 与 $\hat{\sigma}_2$ 的本征态, 并推广到沿任意方向 $\boldsymbol{n}$ 的 Pauli 算符与它的投影算符.

内容概要

- 区分抽象算符与选定基底后的矩阵表示, 掌握厄米, 幺正, 对合三性合一.
- 建立 $\hat{\sigma}_3$ 表象与谱分解, 定义升降算符并求其作用.
- 求解 $\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2$ 的本征态, 理解换表象不改变物理算符.
- 推导任意方向 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 的矩阵, 本征态与投影算符.

8

Pauli 算符与表象

8.1 矩阵与算符

二维 Hilbert 空间 $\mathscr{H}_2 \simeq \mathbb{C}^2$ 上的 Pauli 算符 $\hat{\sigma}_i$ 是抽象线性映射 $\hat{\sigma}_i : \mathscr{H}_2 \to \mathscr{H}_2$, 而 Pauli 矩阵是选定基底后这些算符的具体表示. 在给定基底下二者具有完全相同的矩阵形式, 因此在不会引起混淆时经常不加区别地写 $\hat{\sigma}_i$, 但概念上必须清楚:

算符与矩阵的区别

算符是作用于 $\mathscr{H}_2$ 上的抽象线性映射, 它不依赖任何基底的选取; 矩阵是选定基底后算符的具体表示, 它随基底而变. 对同一算符 $\hat{A}$, 若基底经幺正变换 $\hat{V}$ 改变, 新矩阵为 $\hat{V}^\dagger \hat{A} \hat{V}$. 因此" 换表象" 改变的是矩阵, 不是算符.

这一区别在本部分反复出现. 例如 $\hat{\sigma}_3$ 在本征基下是对角矩阵, 而在其他基底下就不是对角矩阵, 但算符 $\hat{\sigma}_3$ 本身始终不变.

8.2 厄米, 幺正, 对合三性

每个 Pauli 算符同时具有三种性质. 直接由矩阵计算可得

Prop. 1 Pauli 算符的三性

对 $i = 1, 2, 3$,

$$\boxed{\hat{\sigma}_i^\dagger = \hat{\sigma}_i = \hat{\sigma}_i^{-1}}, \qquad \hat{\sigma}_i^2 = \mathbb{1}_2.$$

三种性质分别是厄米性 ($\hat{\sigma}_i^\dagger = \hat{\sigma}_i$), 幺正性 ($\hat{\sigma}_i^\dagger = \hat{\sigma}_i^{-1}$) 与对合性 ($\hat{\sigma}_i^2 = \mathbb{1}_2$). 它们并非互不相关的三条独立性质: 由厄米性与对合性合起来即可推出幺正性,

$$\hat{\sigma}_i^\dagger \hat{\sigma}_i = \hat{\sigma}_i^2 = \mathbb{1}_2.$$

厄米性保证本征值为实数, 因而 $\hat{\sigma}_i$ 可以作为可观测量; 对合性则把本征值限制为 ± 1. 事实上, 设 $\hat{\sigma}_i |\lambda\rangle = \lambda |\lambda\rangle$, 两边再作用一次 $\hat{\sigma}_i$, 利用 $\hat{\sigma}_i^2 = \mathbb{1}_2$ 得 $\lambda^2 = 1$, 所以

$$\lambda = \pm 1. \tag{8.1}$$

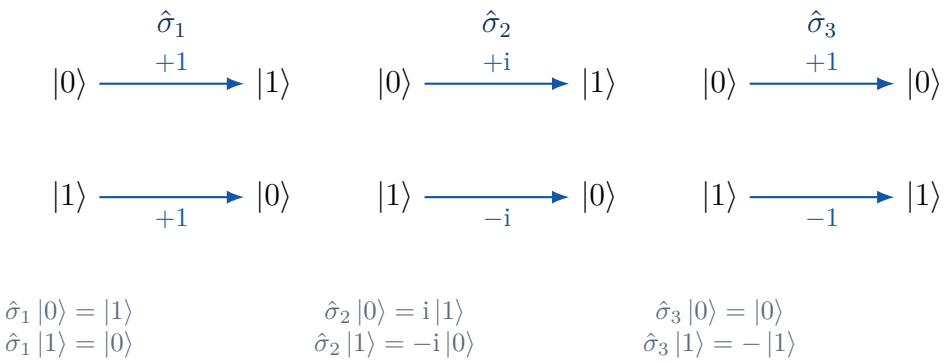


图 4: 三个 Pauli 算符对基态 $|0\rangle, |1\rangle$ 的作用. $\hat{\sigma}_1$ 交换两个基态且相位为 $+1$; $\hat{\sigma}_2$ 同样交换基态, 但引入相对相位 $\pm\mathrm{i}$; $\hat{\sigma}_3$ 不交换, 而是对两个基态分别给出 $+1$ 与 -1. 箭头上标注的是作用后获得的系数.

图 4 直观地总结三个算符对基态的作用: $\hat{\sigma}_1$ 起交换作用, $\hat{\sigma}_2$ 在交换的同时改变相位, $\hat{\sigma}_3$ 区分两个基态而不交换. 这些作用将直接对应 $\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3$ 表象之间的本征态关系 (见第 10 节).

9

$\hat{\sigma}_3$ 表象, 谱分解与升降算符

9.1 $\hat{\sigma}_3$ 的本征值问题与表象

$\hat{\sigma}_3$ 的本征值问题为

$$\hat{\sigma}_3 |\sigma_3\rangle = \sigma_3 |\sigma_3\rangle ,$$

由式(8.1) 本征值为 $\sigma_3 = \pm 1$. 把 $+1$ 本征态记作 $|0\rangle$, -1 本征态记作 $|1\rangle$:

$$\hat{\sigma}_3 |0\rangle = |0\rangle , \qquad \hat{\sigma}_3 |1\rangle = -|1\rangle . \tag{9.1}$$

在 $\hat{\sigma}_3$ 表象中这两个态取列向量形式, 课堂上采用多组等价的记号

$$|0\rangle = |+\rangle = |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} , \qquad |1\rangle = |-\rangle = |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

它们满足正交归一关系

$$\langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1, \qquad \langle 0|1\rangle = \langle 1|0\rangle = 0,$$

以及完备关系

$$|0\rangle \langle 0| + |1\rangle \langle 1| = \mathbb{1}_2. \tag{9.2}$$

完备关系说明任意态都能在这组基下展开:

$$|\psi\rangle = c_0 |0\rangle + c_1 |1\rangle , \qquad c_0 = \langle 0|\psi\rangle , \quad c_1 = \langle 1|\psi\rangle ,$$

归一化条件为 $|c_0|^2 + |c_1|^2 = 1$. 所谓 $\hat{\sigma}_3$ 表象, 就是选择 $\hat{\sigma}_3$ 的两个本征态 $|0\rangle , |1\rangle$ 作为基底. 类似地, 选择其他方向 Pauli 算符的本征态作为基底, 就得到相应方向的自旋表象.

9.2 $\hat{\sigma}_3$ 的谱分解

根据谱分解定理, 把本征值与本征投影重新组合,

$$\hat{\sigma}_3 = (+1) |0\rangle \langle 0| + (-1) |1\rangle \langle 1| = |0\rangle \langle 0| - |1\rangle \langle 1| . \tag{9.3}$$

在 $\hat{\sigma}_3$ 表象中,

$$|0\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad |1\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

于是式(9.3) 重新给出对角矩阵 $\mathrm{diag}(1,-1)$, 与 $\hat{\sigma}_3$ 的定义一致. 反过来, 由完备关系(9.2) 与谱分解(9.3) 可以解出两个本征子空间的投影算符:

$$|0\rangle\langle 0| = \frac{1}{2}(\mathbb{1}_2 + \hat{\sigma}_3), \qquad |1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}(\mathbb{1}_2 - \hat{\sigma}_3).$$

把它们写成矩阵就是 $\mathrm{diag}(1,0)$ 与 $\mathrm{diag}(0,1)$, 与前面的外积形式一致. 这个" 谱分解加完备关系反解投影" 的结构, 在任意方向 $\boldsymbol{n}$ 时会原样重现.

9.3 升降算符

以 $\hat{\sigma}_3$ 本征值的高低为标记, 定义升降算符

Def. 1　升降算符

$$\hat{\sigma}_+ = |0\rangle\langle 1| = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_- = |1\rangle\langle 0| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

它们对两个基态的作用为

$$\hat{\sigma}_+ |1\rangle = |0\rangle, \qquad \hat{\sigma}_+ |0\rangle = 0, \qquad \hat{\sigma}_- |0\rangle = |1\rangle, \qquad \hat{\sigma}_- |1\rangle = 0.$$

因此 $\hat{\sigma}_+$ 把 $\hat{\sigma}_3$ 本征值从 -1 提升到 $+1$, $\hat{\sigma}_-$ 把本征值从 $+1$ 降低到 -1, 这正是" 升" 与" 降" 的含义. 由矩阵相加可得 Pauli 算符与升降算符的相互表示

$$\hat{\sigma}_1 = \hat{\sigma}_+ + \hat{\sigma}_-, \qquad \hat{\sigma}_2 = -\mathrm{i}(\hat{\sigma}_+ - \hat{\sigma}_-), \tag{9.4}$$

反过来,

$$\hat{\sigma}_\pm = \frac{1}{2}(\hat{\sigma}_1 \pm \mathrm{i}\hat{\sigma}_2).$$

升降算符不是厄米的, 它们互为厄米共轭 $\hat{\sigma}_+^\dagger = \hat{\sigma}_-$, 并且是幂零算符 $\hat{\sigma}_+^2 = \hat{\sigma}_-^2 = 0$. 两个乘积则回到 $\hat{\sigma}_3$ 的投影:

$$\hat{\sigma}_+\hat{\sigma}_- = |0\rangle\langle 0| = \frac{1}{2}(\mathbb{1}_2 + \hat{\sigma}_3), \qquad \hat{\sigma}_-\hat{\sigma}_+ = |1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2}(\mathbb{1}_2 - \hat{\sigma}_3).$$

这些关系在后面 Stern–Gerlach 实验中并不直接出现, 但它们是自旋 1/2 角动量代数的雏形, 也为理解 $\hat{\sigma}_1$ 与 $\hat{\sigma}_2$ 的本征态提供了方便.

10

$\hat{\sigma}_1$ 与 $\hat{\sigma}_2$ 的本征态

10.1 $\hat{\sigma}_1$ 的本征态

求解本征方程

$$\hat{\sigma}_1 |\sigma_1;\pm\rangle = \pm |\sigma_1;\pm\rangle ,$$

得到两组本征态:

Prop. 1 $\hat{\sigma}_1$ 的本征态

$$|\sigma_1;+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},$$

$$|\sigma_1;-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}.$$

直接代入可验证: $\hat{\sigma}_1 |\sigma_1;+\rangle$ 把两行交换后仍等于 $|\sigma_1;+\rangle$ 本身, $\hat{\sigma}_1 |\sigma_1;-\rangle$ 交换两行后得到负号. 因此在 $\hat{\sigma}_1$ 的本征基中, $\hat{\sigma}_1$ 是对角矩阵:

$$\left[\hat{\sigma}_1\right]_{\sigma_1} = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}.$$

10.2 $\hat{\sigma}_2$ 的本征态

同理求解

$$\hat{\sigma}_2 |\sigma_2;\pm\rangle = \pm |\sigma_2;\pm\rangle ,$$

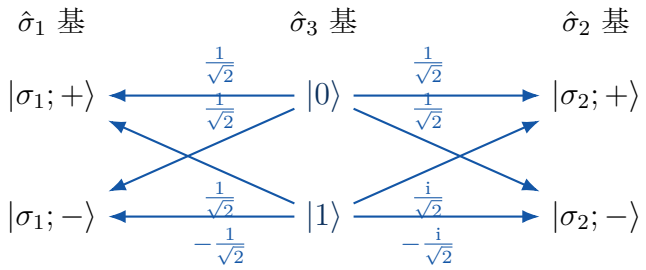
得到

Prop. 2 $\hat{\sigma}_2$ 的本征态

$$|\sigma_2;+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + \mathrm{i}\,|1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\\mathrm{i}\end{pmatrix},$$

$$|\sigma_2;-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - \mathrm{i}\,|1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-\mathrm{i}\end{pmatrix}.$$

同样有 $[\hat{\sigma}_2]_{\sigma_2} = \mathrm{diag}(1,-1)$. 图 5 把三组本征基之间的展开关系画在一起: 中间的 $|0\rangle, |1\rangle$ 是 $\hat{\sigma}_3$ 基, 两侧分别是 $\hat{\sigma}_1$ 与 $\hat{\sigma}_2$ 的本征态, 箭头上的系数就是展开式中的叠加系数.



每一组本征态都构成 $\mathscr{H}_2$ 的一组完备正交基, 相互之间以 $\frac{1}{\sqrt{2}}$ 与相位 i 联系

图 5: 三组 Pauli 本征基之间的关系. 以 $\hat{\sigma}_3$ 基 $|0\rangle, |1\rangle$ 为参照, $\hat{\sigma}_1$ 与 $\hat{\sigma}_2$ 的本征态都是它们的等权叠加, 区别只在于组合系数中的相对相位 (± 1 或 $\pm\mathrm{i}$).

比较两组本征态可以看出, 三组基的区别完全由叠加系数中的相位决定: 从 $\hat{\sigma}_3$ 基到 $\hat{\sigma}_1$ 基, 系数取 $+1$ 或 -1; 到 $\hat{\sigma}_2$ 基, 系数出现 $\pm\mathrm{i}$. 这正是图 4 中 $\hat{\sigma}_2$ 引入相对相位的体现. 需要注意, 所谓" 换表象" 只是改变基底, 物理算符 $\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3$ 并没有变, 改变的只是它们在新基底下的矩阵形式.

11

任意方向的 Pauli 算符

11.1 方向矢量与算符的矩阵形式

取三维单位矢量 $\boldsymbol{n}$, 用球坐标参数化

$$\boldsymbol{n}=\begin{pmatrix}\sin\theta\cos\phi\\ \sin\theta\sin\phi\\ \cos\theta\end{pmatrix},\qquad 0\le\theta\le\pi,\quad 0\le\phi<2\pi. \tag{11.1}$$

沿 $\boldsymbol{n}$ 方向的 Pauli 算符定义为

Def. 1 任意方向的 Pauli 算符

$$\boxed{\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}=\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}=n_1\hat{\sigma}_1+n_2\hat{\sigma}_2+n_3\hat{\sigma}_3}.$$

在 $\hat{\sigma}_3$ 表象中把三个矩阵代入, 得

$$\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}=\begin{pmatrix}n_3 & n_1-\mathrm{i}n_2\\ n_1+\mathrm{i}n_2 & -n_3\end{pmatrix}. \tag{11.2}$$

利用 $n_1\pm\mathrm{i}n_2=\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\phi}$, 式(11.2) 化为

$$\boxed{\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}=\begin{pmatrix}\cos\theta & \sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\\ \sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} & -\cos\theta\end{pmatrix}}. \tag{11.3}$$

图 6 给出 $\boldsymbol{n}$ 在单位球上的球坐标: 极角 θ 从 x_3 轴量起, 方位角 ϕ 在赤道面内从 x_1 轴量起, 图中还画出了 $\boldsymbol{n}$ 在赤道面上的投影.

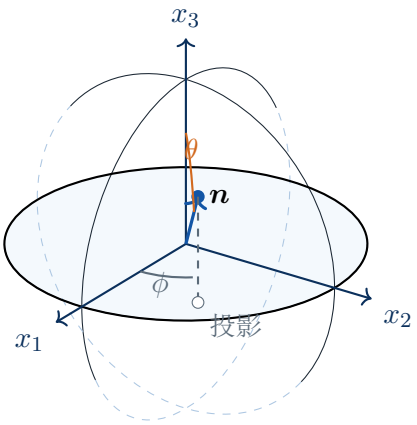


图 6: 任意方向单位矢量 $\boldsymbol{n}$ 的球坐标. 极角 θ 从 x_3 轴量起, 方位角 ϕ 在赤道面内从 x_1 轴量起; 虚线是 $\boldsymbol{n}$ 到赤道面的投影. 方向 $\boldsymbol{n}$ 完全由 (θ,ϕ) 两个角参数确定.

11.2 本征值与本征态

由于 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}^2 = \mathbb{1}_2$,仿照式(8.1) 的论证, $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 的本征值仍为 ±1:

$$\sigma_{\boldsymbol{n}} = \pm 1. \tag{11.4}$$

这再次说明: 无论测量方向如何选取, Pauli 算符都只有两个本征值. 现在推导 $+1$ 本征态. 设 $|\sigma_{\boldsymbol{n}};+\rangle = (a,b)^T$, 本征方程 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}|\sigma_{\boldsymbol{n}};+\rangle = |\sigma_{\boldsymbol{n}};+\rangle$ 的第一行为

$$(\cos\theta - 1)a + \sin\theta\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} b = 0.$$

利用半角公式

$$1-\cos\theta = 2\sin^2\frac{\theta}{2}, \qquad \sin\theta = 2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2},$$

得

$$\frac{b}{a} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\tan\frac{\theta}{2},$$

归一化后取 $a=\cos(\theta/2)$, $b=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin(\theta/2)$, 于是

$$\boxed{|\sigma_{\boldsymbol{n}};+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle}. \tag{11.5}$$

它就是课堂记作 $|\psi(\theta,\phi)\rangle$ 的态, 与 $|\sigma_{\boldsymbol{n}};+\rangle$ 是同一个态. 与它正交的 -1 本征态可以选取为

$$\boxed{|\sigma_{\boldsymbol{n}};-\rangle = -\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\sin\frac{\theta}{2}|0\rangle + \cos\frac{\theta}{2}|1\rangle}. \tag{11.6}$$

容易验证 $\langle\sigma_{\boldsymbol{n}};+|\sigma_{\boldsymbol{n}};-\rangle=0$ 且 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}\,|\sigma_{\boldsymbol{n}};-\rangle=-\,|\sigma_{\boldsymbol{n}};-\rangle$, 两态还满足完备关系

$$|\sigma_{\boldsymbol{n}};+\rangle\langle\sigma_{\boldsymbol{n}};+|+|\sigma_{\boldsymbol{n}};-\rangle\langle\sigma_{\boldsymbol{n}};-|=\mathbb{1}_2.$$

需要注意的是, 式(11.6) 中的 -1 本征态允许乘以任意整体相位: 只要整体相位不变, 不同教材可能写出形式不同但物理等价的表达式. 本讲全章统一使用式(11.6) 这一选法. 图 7 把两个本征态画在球面上, 它们分别指向 $\boldsymbol{n}$ 与 $-\boldsymbol{n}$.

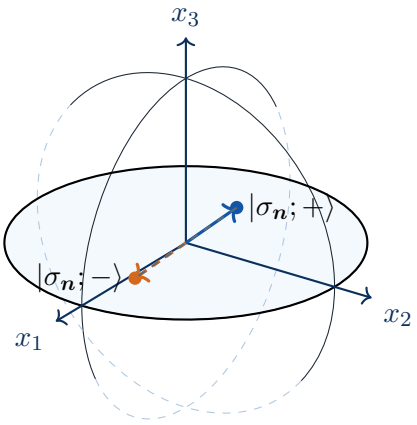


图 7: 任意方向 Pauli 算符的两个本征方向. $|\sigma_{\boldsymbol{n}};+\rangle$ 指向 $\boldsymbol{n}$, $|\sigma_{\boldsymbol{n}};-\rangle$ 指向相反方向 $-\boldsymbol{n}$ (用虚线表示其在球面的背面). 两个方向相反, 对应的本征态正交.

11.3 投影算符

利用谱分解与完备关系, 两个本征方向的投影算符为

Prop. 1　任意方向的投影算符

$$\boxed{\hat{P}_{\boldsymbol{n},\pm}=|\sigma_{\boldsymbol{n}};\pm\rangle\langle\sigma_{\boldsymbol{n}};\pm|=\frac{1}{2}\Big(\mathbb{1}_2\pm\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}\Big)}.$$

Pf　由 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}^2=\mathbb{1}_2$ 直接验证投影性, 正交性与完备性:

$$\hat{P}_{\boldsymbol{n},\pm}^2=\frac{1}{4}\Big(\mathbb{1}_2\pm2\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}+\mathbb{1}_2\Big)=\hat{P}_{\boldsymbol{n},\pm},$$
$$\hat{P}_{\boldsymbol{n},+}\hat{P}_{\boldsymbol{n},-}=0,\qquad \hat{P}_{\boldsymbol{n},+}+\hat{P}_{\boldsymbol{n},-}=\mathbb{1}_2.$$

□

同时, $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 的谱分解写作

$$\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}=(+1)\hat{P}_{\boldsymbol{n},+}+(-1)\hat{P}_{\boldsymbol{n},-}=\hat{P}_{\boldsymbol{n},+}-\hat{P}_{\boldsymbol{n},-}.$$

投影算符 $\hat{P}_{\boldsymbol{n},\pm}$ 在本章末尾的 Stern–Gerlach 实验中承担核心角色: 选择一条输出支路, 在数学上就是施加相应的投影算符.

Part IV

Bloch 球

本部分把二能级纯态参数化, 建立它与三维单位球面上点的一一对应, 标出六个特殊态, 再引入密度矩阵的 Bloch 表示, 说明纯态, 混合态与完全混合态在球上的位置, 并把 Bloch 矢量解释为三个 Pauli 算符的期望值.

内容概要

- 理解四个实参数如何经过归一化与整体相位减少为两个, 得到 $|\psi(\theta,\phi)\rangle$.
- 在 Bloch 球上标出六个特殊态的位置与相位.
- 推导纯态与一般密度矩阵的 Bloch 展开, 区分球面纯态与球内混合态.
- 证明 Bloch 矢量 $\boldsymbol{r}=\langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}\rangle$.

12

Bloch 球

12.1 纯态的参数化

任意归一化的二能级纯态可以写成

$$|\psi\rangle = c_0\,|0\rangle + c_1\,|1\rangle\,, \qquad |c_0|^2 + |c_1|^2 = 1.$$

两个复系数 c_0, c_1 原本包含四个实参数. 归一化条件消去一个实参数; 整体相位没有物理意义, 又消去一个实参数. 因此一个纯态最终由两个实参数决定. 选择适当的整体相位后, 可以写成

Prop. 1 纯态的球坐标参数化

$$\boxed{|\psi(\theta,\phi)\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\,|0\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin\frac{\theta}{2}\,|1\rangle}.$$

其中 $0 \le \theta \le \pi$, $0 \le \phi < 2\pi$.

比较式(11.5) 可以看出, $|\psi(\theta,\phi)\rangle$ 正好就是 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 的 $+1$ 本征态, 其中

$$\boldsymbol{n} = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\phi \\ \sin\theta\sin\phi \\ \cos\theta \end{pmatrix}.$$

因此每个二能级纯态都对应一个三维单位矢量 $\boldsymbol{n}$, 反之亦然. 这就是 Bloch 球的核心思想: 用三维实单位球面上的点来几何化二维复 Hilbert 空间中的物理纯态. 需要注意, 这并不表示 Hilbert 空间本身是三维的, 而是说纯态的空间 $\mathbb{C}P^1$ 同胚于球面 $\mathbb{S}^2$, 单位球只是它的一个方便表示.

12.2 六个特殊态

把若干特殊的角度代入参数化, 得到六个具有典型意义的本征态:

- 北极 $\theta = 0$: $|\psi(0,0)\rangle = |0\rangle$, 对应 $\boldsymbol{n} = (0,0,1)$;
- 南极 $\theta = \pi$: $|\psi(\pi,0)\rangle = |1\rangle$, 对应 $\boldsymbol{n} = (0,0,-1)$;
- $+\boldsymbol{e}_1$ 方向 $(\frac{\pi}{2}, 0)$: $\frac{|0\rangle+|1\rangle}{\sqrt{2}} = |\sigma_1;+\rangle$;
- $-\boldsymbol{e}_1$ 方向 $(\frac{\pi}{2}, \pi)$: $\frac{|0\rangle-|1\rangle}{\sqrt{2}} = |\sigma_1;-\rangle$;
- $+\boldsymbol{e}_2$ 方向 $(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$: $\frac{|0\rangle+\mathrm{i}|1\rangle}{\sqrt{2}} = |\sigma_2;+\rangle$;
- $-\boldsymbol{e}_2$ 方向 $(\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2})$: $\frac{|0\rangle-\mathrm{i}|1\rangle}{\sqrt{2}} = |\sigma_2;-\rangle$.

前两个是 $\hat{\sigma}_3$ 的本征态, 后四个分别是 $\hat{\sigma}_1$ 与 $\hat{\sigma}_2$ 的本征态. 它们在 Bloch 球面上的位置画在图 8 中: 两个极点是 $\hat{\sigma}_3$ 的本征方向, 赤道上的四个点则沿 x_1, x_2 两个互相垂直的方向分布. 这六个态构成三组互相" 无偏" 的基: 任意一组本征态在另一组本征态上的投影的模平方都是 1/2, 这正是图 5 中叠加系数的几何意义.

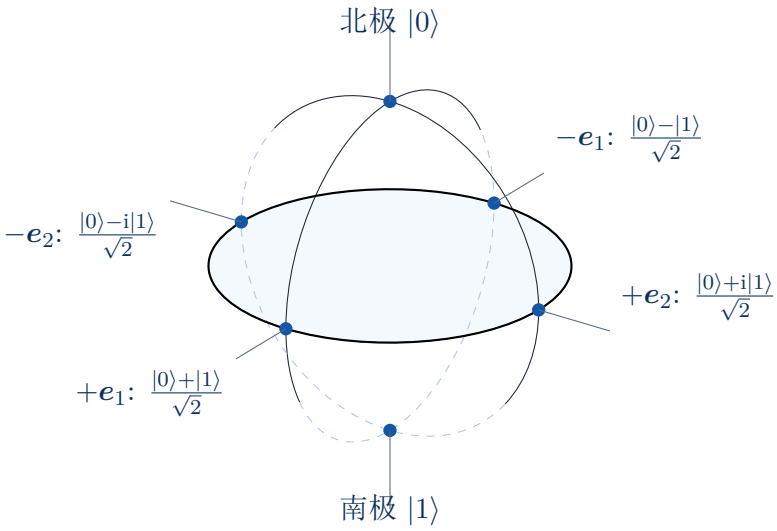


图 8: Bloch 球上的六个特殊态. 两极是 $\hat{\sigma}_3$ 的本征态, 赤道上 $+\boldsymbol{e}_1, -\boldsymbol{e}_1$ 方向是 $\hat{\sigma}_1$ 的本征态, $+\boldsymbol{e}_2, -\boldsymbol{e}_2$ 方向是 $\hat{\sigma}_2$ 的本征态. 引线把公式标签引出球面, 避免公式压到球面上.

12.3 纯态的密度矩阵

对纯态 $|\psi(\theta,\phi)\rangle$ 构造密度矩阵

$$\hat{\rho} = |\psi(\theta,\phi)\rangle\langle\psi(\theta,\phi)|\,.$$

把参数化代入并展开:

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \cos^2\frac{\theta}{2} & \frac{1}{2}\sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \\ \frac{1}{2}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} & \sin^2\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

利用半角公式

$$\cos^2\frac{\theta}{2} = \frac{1+\cos\theta}{2}, \qquad \sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{1-\cos\theta}{2}, \qquad 2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2} = \sin\theta,$$

得到

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1+\cos\theta & \sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} \\ \sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} & 1-\cos\theta \end{pmatrix}. \tag{12.1}$$

与式(11.3) 比较可见, 非对角元由 $\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 的对角化形式给出, 因此

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}\Big(\mathbb{1}_2 + \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\Big), \qquad |\boldsymbol{n}| = 1. \tag{12.2}$$

纯态对应 $|\boldsymbol{n}| = 1$, 位于 Bloch 球面上.

12.4 混合态与 Bloch 球内部

一般二能级系统的密度矩阵是厄米算符, 由第二部分的 Pauli 展开, 可以写成

$$\boxed{\hat{\rho} = \frac{1}{2}\Big(\mathbb{1}_2 + \boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\Big)}. \tag{12.3}$$

正定性要求 $|\boldsymbol{r}| \le 1$. 三种情形对应三种物理状态, 如图 9:

- $|\boldsymbol{r}| = 1$: 纯态, 位于 Bloch 球面上;
- $0 < |\boldsymbol{r}| < 1$: 混合态, 位于 Bloch 球内部;
- $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{0}$: 完全混合态 $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\mathbb{1}_2$, 位于球心.

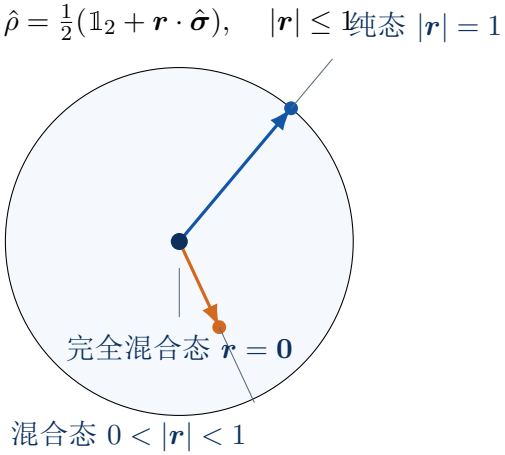


图 9: Bloch 球内部的三类状态. 长度为 1 的矢量对应球面上的纯态, 长度小于 1 的矢量对应球内的混合态, 球心是 $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\mathbb{1}_2$ 的完全混合态.

这里需要明确区分两种" 混合". 式(12.2) 的纯态是态矢量的相干叠加 $|\psi(\theta,\phi)\rangle$, 它的非对角元承载相位信息; 式(12.3) 中 $|\boldsymbol{r}| < 1$ 的混合态则是不同纯态按经典概率的统计混合, 整体相位的差别不再存在. 密度矩阵同时容纳这两种描述, 是它相对于态矢量更一般的根本原因.

12.5 Bloch 矢量与期望值

由式(12.3) 与迹关系 $\mathrm{Tr}(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j) = 2\delta_{ij}$ 可以把 $\boldsymbol{r}$ 的分量提取出来:

$$\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{\sigma}_i) = \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\Big((\mathbb{1}_2 + \boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})\hat{\sigma}_i\Big) = \frac{1}{2}\Big(\mathrm{Tr}\,\hat{\sigma}_i + r_j\,\mathrm{Tr}(\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_i)\Big) = r_i.$$

而 $\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{\sigma}_i) = \langle\hat{\sigma}_i\rangle$ 正是 Pauli 算符的期望值. 因此

Prop. 2 Bloch 矢量

$$\boxed{\boldsymbol{r} = \langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}\rangle}.$$

即 Bloch 矢量由三个 Pauli 算符的期望值组成:

$$\boldsymbol{r} = \begin{pmatrix} \langle\hat{\sigma}_1\rangle \\ \langle\hat{\sigma}_2\rangle \\ \langle\hat{\sigma}_3\rangle \end{pmatrix}.$$

对纯态 $|\psi(\theta,\phi)\rangle$, 由式(12.2) 得 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{n}$, 因此 $\langle\hat{\sigma}_i\rangle = n_i$. 图 10 画出一般情形下 Bloch 矢量及其在三个坐标轴上的正交投影, 投影长度正是三个期望值.

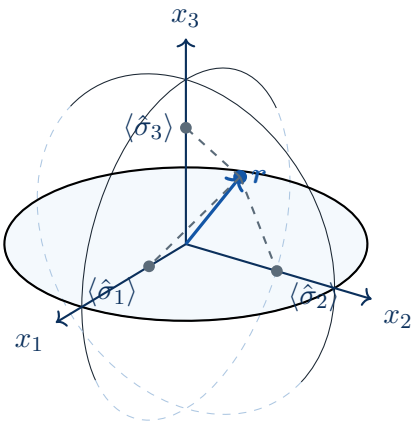


图 10: Bloch 矢量 $\boldsymbol{r} = \langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}\rangle$ 及其正交投影. 三个坐标轴上的投影分别是 $\langle\hat{\sigma}_1\rangle, \langle\hat{\sigma}_2\rangle, \langle\hat{\sigma}_3\rangle$. 对纯态, $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{n}$, 矢量恰好落在球面上.

对自旋 1/2 粒子, $\hat{\boldsymbol{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, 所以 $\langle\hat{\boldsymbol{S}}\rangle = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{r}$. 因此 Bloch 矢量描述的是平均自旋的方向, 而 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 表示沿该方向进行二值测量的可观测量. 这两种视角 – 平均方向与二值测量 – 在下一部分的 Stern–Gerlach 实验中被明确区分开.

Part V

自旋 1/2 与 Stern--Gerlach 实验

本部分把 Pauli 算符与自旋算符 $\hat{\boldsymbol{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ 联系起来, 然后用 Stern–Gerlach 实验把抽象的本征值, 本征态, 态制备与测量概率具体实现出来, 最后用几何语言说明不同方向测量何时相容.

内容概要

- 明确 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 与 $\hat{S}_{\boldsymbol{n}}$ 本征值的区别 (± 1 与 $\pm\frac{\hbar}{2}$).
- 理解 Stern–Gerlach 装置既是测量装置又是态制备装置.
- 分析三个级联实验的输入态, 基底展开, 支路概率与测量后状态.
- 推导任意两方向的测量概率与对易关系, 掌握其几何意义.

13

Pauli 算符与自旋 1/2

对自旋 1/2 系统, 自旋角动量算符定义为

Def. 1　自旋算符

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}}.$$

因此三个分量为 $\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i$, 沿任意方向 $\boldsymbol{n}$ 的自旋分量为

$$\hat{S}_{\boldsymbol{n}} = \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}.$$

由于 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 的本征值为 ± 1, $\hat{S}_{\boldsymbol{n}}$ 的本征值为

$$S_{\boldsymbol{n}} = \pm\frac{\hbar}{2}. \tag{13.1}$$

这里必须严格区分两种本征值:

± 1 与 $\pm\frac{\hbar}{2}$

$\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 的本征值是 ± 1, 无量纲; $\hat{S}_{\boldsymbol{n}}$ 的本征值是 $\pm\frac{\hbar}{2}$, 具有角动量量纲. 二者只相差常数 $\hbar/2$, 因此本征态完全相同: 满足 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}\,|\sigma_{\boldsymbol{n}};\pm\rangle = \pm\,|\sigma_{\boldsymbol{n}};\pm\rangle$ 的态也是 $\hat{S}_{\boldsymbol{n}}$ 相应于 $\pm\frac{\hbar}{2}$ 的本征态. 约定不同, 物理内容不变, 但混用会造成量纲错误.

三个自旋分量满足角动量代数

$$\left[\hat{S}_i, \hat{S}_j\right] = \mathrm{i}\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{S}_k, \tag{13.2}$$

它可由 $[\hat{\sigma}_i, \hat{\sigma}_j] = 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$ 乘以 $(\hbar/2)^2$ 得到. 特别是 $\left[\hat{S}_1, \hat{S}_3\right] = -\mathrm{i}\hbar\hat{S}_2 \neq 0$. 这一不对易性正是下一节实验现象的算符根源.

14

Stern--Gerlach 实验

14.1 装置的基本思想

Stern–Gerlach 实验把一束具有磁矩的中性原子送入不均匀磁场. 中性原子整体不带电, 但具有磁矩, 磁矩与自旋角动量成正比

$$\hat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma \hat{\boldsymbol{S}},$$

其中 γ 是旋磁比. 磁矩在磁场中的相互作用哈密顿量为

$$\hat{H}_{\text{int}} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \boldsymbol{B}.$$

若磁场主要沿 x_3 方向, 并在该方向存在梯度, 则

$$\hat{H}_{\text{int}} \simeq -\hat{\mu}_3 B_3,$$

原子受到沿 x_3 方向的力为

$$\hat{F}_3 = -\frac{\partial \hat{H}_{\text{int}}}{\partial x_3} = \hat{\mu}_3 \frac{\partial B_3}{\partial x_3}. \tag{14.1}$$

因此不同的磁矩 x_3 分量会使原子沿不同方向偏转. 图 11 画出整套装置: 原子源经准直狭缝射入非均匀磁场, 出射后打到屏幕上.

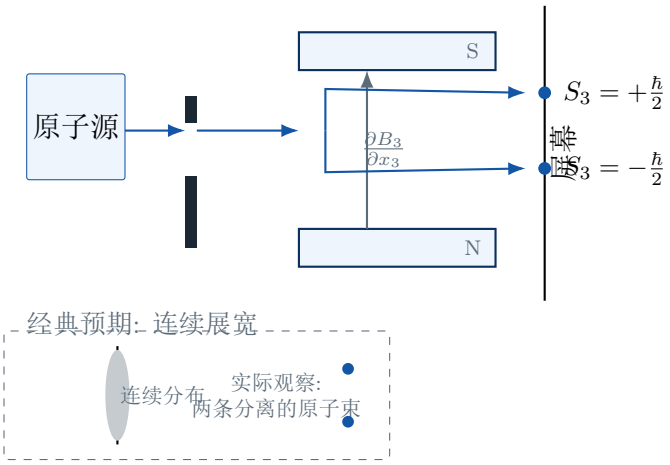


图 11: Stern–Gerlach 装置与两种预期. 原子源经准直狭缝产生细束, 通过沿 x_3 方向有梯度的非均匀磁场后偏转, 在屏幕上留下两个分离落点. 左下小图对比: 经典图像中磁矩取向连续, 预期在屏幕上出现连续展宽的条带; 实验实际观察到两条分离的原子束, 对应 $S_3 = \pm\frac{\hbar}{2}$ 两个本征值.

经典图像中, 如果磁矩方向可以连续取值, 则 μ_3 连续变化, 屏幕上应当出现连续展宽的分布. 但实验观察到原子束分裂为两束, 分别对应

$$S_3 = +\frac{\hbar}{2} \qquad 与 \qquad S_3 = -\frac{\hbar}{2}.$$

这正是式(13.1) 中 $\hat{S}_3$ 的两个本征值. 因此 Stern–Gerlach 实验直接说明: 沿所选择方向的自旋测量只有两个可能结果, 这是量子力学测量公理在最简单的非平凡系统上的直接体现.

14.2 测量装置与态制备装置

把沿 x_3 方向的不均匀磁场装置记作 SG_3. 它测量 $\hat{\sigma}_3$ 或等价的 $\hat{S}_3 = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_3$, 两个输出支路分别为

$$\begin{aligned} |0\rangle \quad &\Longleftrightarrow \quad \sigma_3 = +1 \quad \Longleftrightarrow \quad S_3 = +\frac{\hbar}{2}, \\ |1\rangle \quad &\Longleftrightarrow \quad \sigma_3 = -1 \quad \Longleftrightarrow \quad S_3 = -\frac{\hbar}{2}. \end{aligned}$$

如果把某一支路挡住, 只保留另一支路, 输出的原子束就处于确定的本征态. 例如挡住 $S_3 = -\hbar/2$ 支路, 输出原子束处于 $|0\rangle$. 因此 SG_3 装置既可以作为测量装置 (告诉入射束中各成分的比例), 也可以作为态制备装置 (筛选出确定的本征态). 沿任意方向 $\boldsymbol{n}$ 的装置 $SG_{\boldsymbol{n}}$ 同理: 它测量 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}} = \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, 把原子束分成 $|\sigma_{\boldsymbol{n}};+\rangle$ 与 $|\sigma_{\boldsymbol{n}};-\rangle$ 两条支路.

测量与态制备必须分开 (见概念辨析): 测量装置给出结果与概率, 而" 经过装置并选择某一支路" 同时制备了测量后的状态. 下面的级联实验反复利用这两个功能.

14.3 同方向的连续测量

先通过第一个 SG_3 的正支路制备 $|0\rangle$, 再把这束原子送入第二个 SG_3. 由于

$$\hat{\sigma}_3 |0\rangle = |0\rangle ,$$

第二次测量必定仍得到 $\sigma_3 = +1$:

$$P(\sigma_3 = +1) = 1, \qquad P(\sigma_3 = -1) = 0.$$

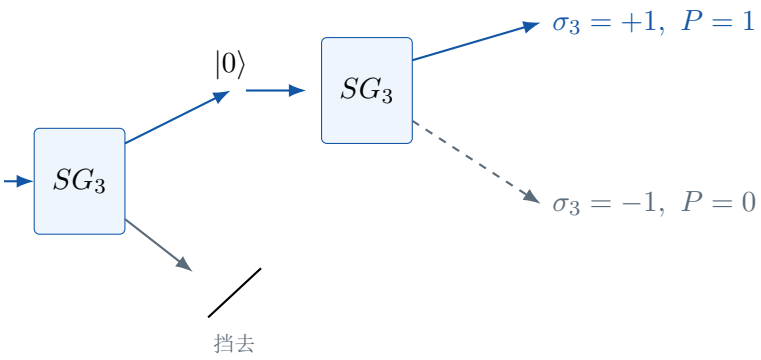


图 12: $SG_3 \to SG_3$ 级联. 第一个 SG_3 的负支路被挡去, 选出的正支路 $|0\rangle$ 进入第二个 SG_3, 全部原子从正支路射出 ($P = 1$), 负支路为空 ($P = 0$). 同方向重复测量在已处于本征态的条件下结果不变.

如图 12 所示, 第二次测量只出现正支路. 这说明第一次测量之后系统已处于 $\hat{\sigma}_3$ 的本征态 $|0\rangle$: 在同方向本征态上, 测量结果确定, 概率为 1. 这是投影测量的自然推论 – 测量后状态是投影到相应本征子空间的态, 重复测量不再改变它.

14.4 先测 $\hat{\sigma}_3$ 再测 $\hat{\sigma}_1$

把 SG_3 正支路制备的 $|0\rangle$ 送入 SG_1. 将 $|0\rangle$ 在 $\hat{\sigma}_1$ 本征基中展开,

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\sigma_1;+\rangle + |\sigma_1;-\rangle\Big).$$

因此两个测量结果的概率为

$$P(\sigma_1 = +1) = \Big|\langle\sigma_1;+|0\rangle\Big|^2 = \frac{1}{2}, \qquad P(\sigma_1 = -1) = \Big|\langle\sigma_1;-|0\rangle\Big|^2 = \frac{1}{2}.$$

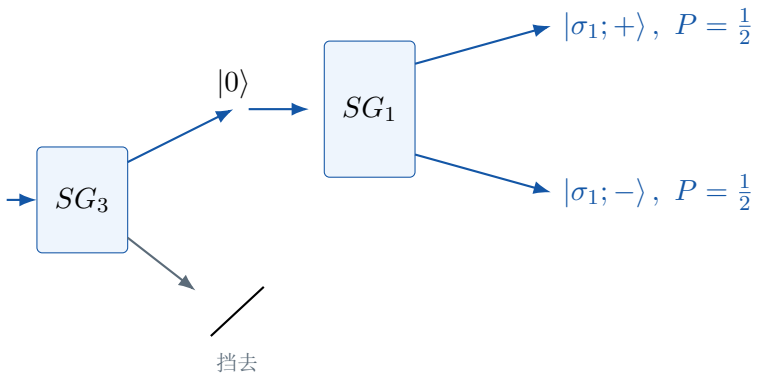


图 13: $SG_3 \to SG_1$ 级联. 输入 $|0\rangle$ 在 $\hat{\sigma}_1$ 本征基中展开为等权叠加, 两个支路 $|\sigma_1;+\rangle$ 与 $|\sigma_1;-\rangle$ 各以概率 1/2 出现. $|0\rangle$ 是 $\hat{\sigma}_3$ 的本征态, 但不是 $\hat{\sigma}_1$ 的本征态.

如图 13 所示, 实验上 SG_1 后的原子束等强度地分成两束. 这说明 $|0\rangle$ 虽然是 $\hat{\sigma}_3$ 的本征态, 却不是 $\hat{\sigma}_1$ 的本征态: 尽管 S_3 已经完全确定, S_1 的测量结果仍然是随机的. 这里

的” 各有一半” 来自概率幅的模方, 而不是因为一半原子原来具有 $\sigma_1 = +1$, 另一半具有 $\sigma_1 = -1$.

14.5 中间测量破坏原先确定的分量

考虑三级联装置

$$SG_3 \longrightarrow SG_1 \longrightarrow SG_3.$$

先选择第一个 SG_3 的正支路, 系统处于 $|0\rangle$; 再选择 SG_1 的正支路, 系统变为

$$|\sigma_1;+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|0\rangle + |1\rangle\big);$$

最后再次测量 $\hat{\sigma}_3$, 得到

$$P(\sigma_3 = +1) = \big|\langle 0|\sigma_1;+\rangle\big|^2 = \frac{1}{2}, \qquad P(\sigma_3 = -1) = \big|\langle 1|\sigma_1;+\rangle\big|^2 = \frac{1}{2}.$$

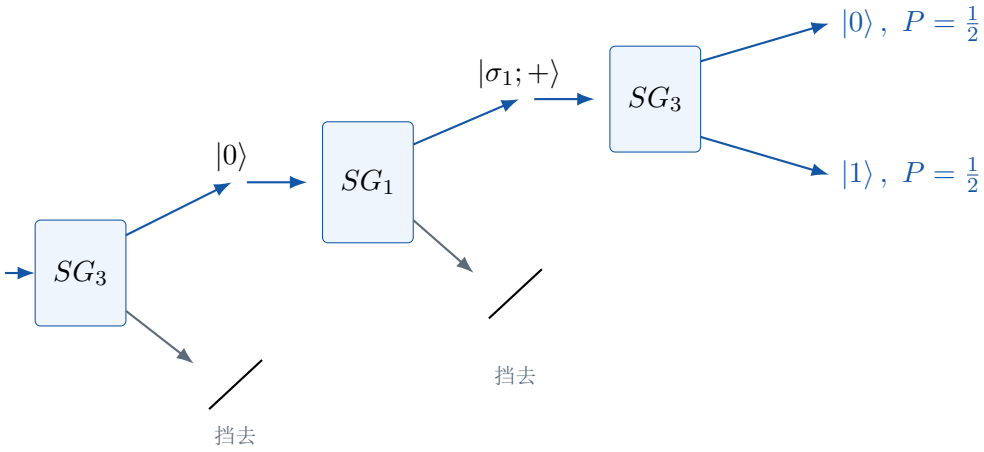


图 14: $SG_3 \to SG_1 \to SG_3$ 级联. 第一个 SG_3 制备 $|0\rangle$, SG_1 的负支路被挡去, 只保留正支路 $|\sigma_1;+\rangle$; 最后送入第二个 SG_3, 两条支路重新以概率 $1/2$ 各出现一次. 中间测量使最初确定的 $S_3 = +\frac{\hbar}{2}$ 信息丢失.

如图 14 所示, 虽然最初已经制备了确定的 $\sigma_3 = +1$ 态, 但中间进行 $\hat{\sigma}_1$ 测量后, 原先确定的 σ_3 信息不再保留. 其算符原因是

$$[\hat{\sigma}_3, \hat{\sigma}_1] = 2\mathrm{i}\hat{\sigma}_2 \neq 0,$$

所以 $\hat{\sigma}_3$ 与 $\hat{\sigma}_1$ 没有共同本征态: $|0\rangle$ 虽是 $\hat{\sigma}_3$ 的本征态, 却同时是 $\hat{\sigma}_1$ 两个本征态的等权叠加. 因此不能把测量理解为” 被动读取粒子原本就具有的数值” – 在量子力学中, 测量通常伴随状态改变.

14.6 任意两个方向的测量概率

设系统处于沿 $\boldsymbol{n}$ 方向的正本征态 $|\sigma_{\boldsymbol{n}};+\rangle$, 随后测量沿 $\boldsymbol{m}$ 方向的 Pauli 算符 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{m}}$. 正结果对应的投影算符为

$$\hat{P}_{\boldsymbol{m},+}=\frac{1}{2}\Big(\mathbb{1}_2+\boldsymbol{m}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\Big),$$

初态密度矩阵为

$$\hat{\rho}_{\boldsymbol{n},+}=\frac{1}{2}\Big(\mathbb{1}_2+\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}\Big).$$

由 Born 规则, 正结果的概率为

$$\begin{aligned}P(\boldsymbol{m},+|\boldsymbol{n},+)&=\operatorname{Tr}\Big(\hat{\rho}_{\boldsymbol{n},+}\hat{P}_{\boldsymbol{m},+}\Big)\\&=\frac{1}{4}\operatorname{Tr}\Big((\mathbb{1}_2+\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})(\mathbb{1}_2+\boldsymbol{m}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}})\Big)\\&=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m}),\end{aligned}\tag{14.2}$$

其中用到 $\operatorname{Tr}\mathbb{1}_2=2$, $\operatorname{Tr}\hat{\sigma}_i=0$ 与 $\operatorname{Tr}(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j)=2\delta_{ij}$. 若 α 是 $\boldsymbol{n}$ 与 $\boldsymbol{m}$ 的夹角, 则 $\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m}=\cos\alpha$, 于是

Prop. 1　任意两方向的测量概率

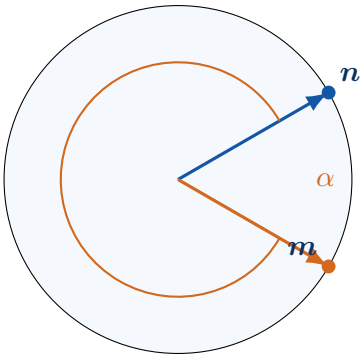
$$\boxed{P(\boldsymbol{m},+|\boldsymbol{n},+)=\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m})=\cos^2\frac{\alpha}{2}},$$

$$\boxed{P(\boldsymbol{m},-|\boldsymbol{n},+)=\frac{1}{2}(1-\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m})=\sin^2\frac{\alpha}{2}}.$$

三个特殊情况值得单独记住:

$$\alpha=0:\quad P_+=1,\ P_-=0,\qquad \alpha=\frac{\pi}{2}:\quad P_+=P_-=\frac{1}{2},\qquad \alpha=\pi:\quad P_+=0,\ P_-=1.$$

同方向重复测量得到相同结果; 垂直方向等概率; 反方向的正本征态等价于原方向的负本征态. 图 15 把这一公式画在球上: 概率完全由两个方向的夹角 α 决定.



$$P(\boldsymbol{m},+|\boldsymbol{n},+)=\cos^2\tfrac{\alpha}{2},\qquad P(\boldsymbol{m},-|\boldsymbol{n},+)=\sin^2\tfrac{\alpha}{2}$$

图 15: 任意两方向测量概率的几何表示. 在包含 $\boldsymbol{n}$ 与 $\boldsymbol{m}$ 的大圆截面上, 两者夹角为 α; 沿 $\boldsymbol{m}$ 测量得到 $+$ 与 $-$ 的概率分别是 $\cos^2\frac{\alpha}{2}$ 与 $\sin^2\frac{\alpha}{2}$. 概率被转化为球面上的几何夹角.

这一结果把 Stern–Gerlach 实验与 Bloch 球几何直接联系起来: 测量概率不再是抽象的内积模方, 而是两个方向之间的夹角. 这正是第四部分建立的几何语言的回报.

14.7 不同方向算符的对易关系

沿两个方向 $\boldsymbol{n},\boldsymbol{m}$ 的 Pauli 算符的对易子可以用对易关系式(2.1) 直接展开:

$$\begin{aligned}[\hat\sigma_{\boldsymbol{n}},\hat\sigma_{\boldsymbol{m}}]&=[n_i\hat\sigma_i,m_j\hat\sigma_j]\\&=n_im_j[\hat\sigma_i,\hat\sigma_j]\\&=2\mathrm{i}\,n_im_j\varepsilon_{ijk}\hat\sigma_k\\&=2\mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m}).\end{aligned}\tag{14.3}$$

因此

Prop. 2 不同方向 Pauli 算符的对易关系

$$\boxed{[\hat\sigma_{\boldsymbol{n}},\hat\sigma_{\boldsymbol{m}}]=2\mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m})}.$$

当且仅当 $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m}=\boldsymbol{0}$, 即两个方向平行或反平行时, 两个 Pauli 算符对易. 否则它们不对易, 没有共同本征态, 相应的 *SG* 测量是不相容测量. 图 16 把这一几何判据画出来.

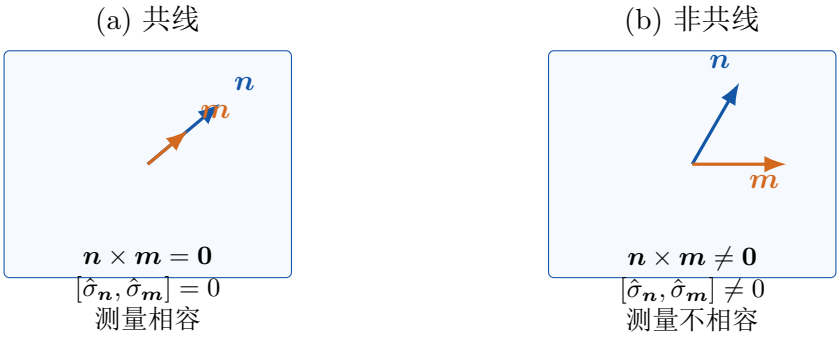


图 16: 对易与测量相容性的几何判据. (a) 两个方向平行或反平行时叉积为零, 算符对易, 测量相容; (b) 两个方向非共线时叉积非零, 算符不对易, 测量不相容, 不能同时确定两个方向的自旋分量.

这与式(13.2) 的自旋对易关系一致: 例如 $\left[\hat{S}_1, \hat{S}_3\right] = -\mathrm{i}\hbar\hat{S}_2 \neq 0$, 对应 $\boldsymbol{e}_1 \times \boldsymbol{e}_3 = -\boldsymbol{e}_2 \neq 0$. 几何上, 只有测量轴完全共线的 *SG* 装置才互相相容; 一旦方向不同, 先后测量就会互相干扰. 这正是第五部分一开头” 自旋分量为什么不能同时确定” 的完整答案.

15

本章总结

全章从矩阵代数出发,经过算符与表象, 到达 Bloch 几何与实验, 这正是图 1 的逻辑地图. 五个环节各贡献一个不可替代的要素:

环节	在全章中的作用
Pauli 矩阵	提供封闭的代数结构, 一切计算的起点
Pauli 算符	表示二能级系统的可观测量, 三性合一
本征态与投影算符	连接状态与测量, 给出态制备的数学描述
Bloch 球	把纯态与混合态几何化为单位球面上的点
Stern–Gerlach 实验	实现态制备与方向测量, 验证 $\pm\frac{\hbar}{2}$

回顾每一部分的推进方式: 第一部分建立 Pauli 矩阵的乘法代数与矢量恒等式; 第二部分证明它们构成 $M_2(\mathbb{C})$ 的基底, 并由此写出密度矩阵的 Bloch 展开与指数算符; 第三部分把矩阵解释为算符, 建立 $\hat{\sigma}_3$ 表象, 求出任意方向 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 的本征态与投影算符; 第四部分用 Bloch 球给出几何表示, 说明纯态与混合态的位置; 第五部分以自旋 1/2 为桥梁, 用 Stern–Gerlach 实验实现了本征值, 态制备与测量概率.

贯穿全章的一条主线是: 二能级系统的全部结构都由三维矢量的运算控制. Pauli 乘法公式归结为点积与叉积, Bloch 矢量与期望值对应, 测量概率归结为夹角, 对易性归结为共线. 这套” 代数–算符–状态–几何–实验” 的完整链条, 就是本讲所要传达的量子力学基本图景.

A

核心公式速查

主题	公式
Pauli乘法公式	$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = \delta_{ij}\mathbb{1}_2 + \mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k$
对易, 反对易	$[\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j] = 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k,\quad \{\hat{\sigma}_i,\hat{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}\mathbb{1}_2$
迹与行列式	$\mathrm{Tr}\,\hat{\sigma}_i = 0,\ \mathrm{Tr}(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j) = 2\delta_{ij},\ \mathrm{Tr}(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_k) = 2\mathrm{i}\varepsilon_{ijk},\ \det\hat{\sigma}_i = -1$
Pauli 矢量恒等式	$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{A})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B})\mathbb{1}_2 + \mathrm{i}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})$
任意方向算符	$\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}} = \boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}},\ \hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}^2 = \mathbb{1}_2$, 本征值 ±1
投影算符	$\hat{P}_{\boldsymbol{n},\pm} = \frac{1}{2}(\mathbb{1}_2 \pm \hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}})$
指数公式	$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}} = \cos\theta\,\mathbb{1}_2 + \mathrm{i}\sin\theta\,\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}},\ \hat{U}(\boldsymbol{n},\alpha) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\alpha\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}}$
本征态	$\lvert\sigma_{\boldsymbol{n}};+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}\lvert0\rangle + \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sin\frac{\theta}{2}\lvert1\rangle,\ \lvert\sigma_{\boldsymbol{n}};-\rangle$ 正交
密度矩阵	$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\mathbb{1}_2 + \boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}),\ \lvert\boldsymbol{r}\rvert \le 1,\ \boldsymbol{r} = \langle\hat{\boldsymbol{\sigma}}\rangle$
自旋	$\hat{\boldsymbol{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}},\ \hat{S}_n$ 本征值 $\pm\frac{\hbar}{2}$
测量概率	$P(\boldsymbol{m},\pm\lvert\boldsymbol{n},+) = \frac{1}{2}(1\pm\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{m}) = \cos^2\frac{\alpha}{2}$ 或 $\sin^2\frac{\alpha}{2}$
对易关系	$[\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}},\hat{\sigma}_{\boldsymbol{m}}] = 2\mathrm{i}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot(\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m})$

B

符号与物理意义对照表

符号	含义
$\mathscr{H}_2 \simeq \mathbb{C}^2$	二能级系统的 Hilbert 空间
$\mathbb{1}_2$	二维 Hilbert 空间中的单位算符
$\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\sigma}_3$	三个 Pauli 算符 (对应方向 x_1, x_2, x_3)
$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$	Pauli 矢量算符
$\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$	沿单位矢量 $\boldsymbol{n}$ 的 Pauli 算符, 本征值 ± 1
$\hat{\boldsymbol{S}}$, $\hat{S}_{\boldsymbol{n}}$	自旋算符及其 $\boldsymbol{n}$ 分量, 本征值 $\pm\frac{\hbar}{2}$
$\lvert 0\rangle$, $\lvert 1\rangle$	$\hat{\sigma}_3$ 的 $+1, -1$ 本征态
$\lvert \sigma_{\boldsymbol{n}}; +\rangle$, $\lvert \sigma_{\boldsymbol{n}}; -\rangle$	$\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 的两个本征态
$\hat{P}_{\boldsymbol{n},\pm}$	沿 $\boldsymbol{n}$ 方向两个结果的投影算符
$\boldsymbol{r}$	状态的 Bloch 矢量, $\lvert\boldsymbol{r}\rvert \le 1$
$\hat{\rho}$	密度算符
$\boldsymbol{n}$	单位方向矢量 (球坐标 (θ, ϕ))
$\hat{U}(\boldsymbol{n}, \alpha)$	绕 $\boldsymbol{n}$ 旋转 α 的自旋旋转算符
$SG_{\boldsymbol{n}}$	沿 $\boldsymbol{n}$ 方向的不均匀磁场装置 (测量与态制备)
$P(\boldsymbol{m}, \pm \lvert \boldsymbol{n}, +)$	先处于 $\boldsymbol{n}$ 正本征态再测 $\boldsymbol{m}$ 得到 $\pm$ 的概率
δ_{ij}	Kronecker 符号
ε_{ijk}	Levi–Civita 符号
i, e, $\hbar$	虚数单位, 自然常数, 约化 Planck 常数

C

练习

1. 用 Pauli 乘法公式计算 $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2\hat{\sigma}_3$ 以及 $(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{a})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{b})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{c})$, 其中 $\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{c}$ 是任意三维矢量.
2. 对给定的 θ,ϕ, 验证式(11.5) 与(11.6) 确实是 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 的 ±1 本征态, 并验证 $|\sigma_{\boldsymbol{n}};-\rangle$ 取其他整体相位时物理不变.
3. 设
$$\hat{\rho}=\begin{pmatrix}\frac{3}{4} & \frac{\mathrm{i}}{4}\\ -\frac{\mathrm{i}}{4} & \frac{1}{4}\end{pmatrix}.$$
求它的 Bloch 矢量 $\boldsymbol{r}$ 与纯度 $\operatorname{Tr}\hat{\rho}^2$, 并判断它是纯态还是混合态.
4. 系统处于 $|\sigma_{\boldsymbol{n}};+\rangle$, 其中 $\boldsymbol{n}$ 与 $\boldsymbol{m}$ 的夹角为 60°. 沿 $\boldsymbol{m}$ 方向测量, 求两条支路的概率.
5. 判断下列两个方向的测量是否相容: $\boldsymbol{n}=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,1,0)$, $\boldsymbol{m}=\frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1,0)$. 若不相容, 求出 $[\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}},\hat{\sigma}_{\boldsymbol{m}}]$.

C.1 练习提示

1. 先算 $\hat{\sigma}_1\hat{\sigma}_2=\mathrm{i}\hat{\sigma}_3$, 再乘 $\hat{\sigma}_3$ 得 $\mathrm{i}\mathbb{1}_2$; 三重乘积利用乘法公式展开, 结果含 $\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ 与 $\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}$ 的组合.
2. 直接代入 $\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}$ 的矩阵(11.3) 即可; 整体相位 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta}$ 不改变内积模方与投影算符.
3. 由 $\boldsymbol{r}=(\operatorname{Tr}(\hat{\rho}\hat{\sigma}_1),\operatorname{Tr}(\hat{\rho}\hat{\sigma}_2),\operatorname{Tr}(\hat{\rho}\hat{\sigma}_3))$ 得 $\boldsymbol{r}=(0,-\frac{1}{2},\frac{1}{2})$, 从而 $|\boldsymbol{r}|=\frac{1}{\sqrt{2}}<1$, $\operatorname{Tr}\hat{\rho}^2=\frac{3}{4}<1$, 是混合态.
4. $P_+=\cos^2 30^\circ=\frac{3}{4}$, $P_-=\sin^2 30^\circ=\frac{1}{4}$.
5. $\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{m}=(0,0,-1)\neq0$, 故不相容, 且 $[\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}},\hat{\sigma}_{\boldsymbol{m}}]=-2\mathrm{i}\hat{\sigma}_3\neq0$.