3.4.3 泡利算符和泡利矩阵

定义泡利算符为

$$\boldsymbol{\sigma} \equiv \mathbf{S}/(\frac{\hbar}{2}). \tag{3.100}$$

是方便的. 我们有

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1; \tag{3.101}$$

对易关系(3.92)改写为

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \tag{3.102}$$

根据

$$\sigma_x(\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x) = 2i\sigma_x\sigma_z, \tag{3.103}$$

$$\sigma_y - \sigma_x\sigma_y\sigma_x = 2i\sigma_x\sigma_z \tag{3.104}$$

类似地

$$(\sigma_x\sigma_y - \sigma_y\sigma_x)\sigma_x = 2i\sigma_z\sigma_x, \tag{3.105}$$

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_x - \sigma_y = 2i\sigma_x\sigma_z \tag{3.106}$$

所以

$$\sigma_x\sigma_z + \sigma_z\sigma_x = 0 \tag{3.107}$$

这称为正对易$\{\sigma_x, \sigma_z\} = 0$. 同理$\{\sigma_x, \sigma_y\} = \{\sigma_y, \sigma_z\} = 0$.

再考虑$[\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y$, 有

$$\sigma_z\sigma_x = i\sigma_y \tag{3.108}$$

及其轮转关系. **Eq.(3.101)和(3.108)是描述自旋算符性质的最重要的两个公式.**

自然, σ_z的矩阵形式为

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1, & 0 \\ 0, & -1 \end{pmatrix}. \tag{3.109}$$

可以假设

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} a, & x \\ x^*, & b \end{pmatrix}. \tag{3.110}$$

其中考虑了厄密性，a, b是实数. 利用Eq.(3.107), 容易证明$a = b = 0$.

根据$\sigma_x^2 = 1$,

$$\begin{pmatrix} |x|^2, & 0 \\ 0, & |x|^2 \end{pmatrix} = 1, \tag{3.111}$$

1表示单位矩阵. x可以是任意模为1的复数, 按泡利的方案, 取$x = 1$. 于是

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0, & 1 \\ 1, & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.112}$$

再来求$S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$的矩阵:

$$\sigma_y = i\sigma_x\sigma_z = \begin{pmatrix} 0, & -i \\ i, & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.113}$$

这样定出的$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$矩阵就是著名的**泡利矩阵**.

3.5 期望值和本征方程的矩阵形式

我们已经知道任意算符$\hat{Q}$都可以写成某表象(以某力学量A的本征矢$\{|i\rangle\}$为基, 称A表象)下的矩阵. 其元素$Q_{i,j}=\langle i|\hat{Q}|j\rangle$. 力学量算符(厄密的)的矩阵是厄密矩阵$Q_{i,j}=(Q_{j,i})^*$.

3.5.1 期望值

考虑力学量Q在状态$|\alpha\rangle$的期望值. 按量子力学测量原理，我们发现期望值为内积:

$$\langle Q\rangle=\langle\alpha|Q|\alpha\rangle, \tag{3.114}$$

这是因为

$$\langle\alpha|Q|\alpha\rangle=\sum_{i,j}\langle\alpha|q_i\rangle\langle q_i|Q|q_j\rangle\langle q_j|\alpha\rangle=\sum_i q_i|c_i|^2. \tag{3.115}$$

这里$|q_i\rangle$ 是Q的本征态，本征值为q_i.

$$Q|q_i\rangle=q_i|q_i\rangle;\qquad i=1,\cdots,N. \tag{3.116}$$

$\langle q_i|\alpha\rangle=c_i$是测量值为$q_i$的几率幅. 上式利用了$Q$本征矢的完备性以及正交归一性$\langle q_i|q_j\rangle=\delta_{ij}$.

在一个确定表象下，比如这里的A表象下，这个期望值可以这样算出:

$$\langle\alpha|Q|\alpha\rangle=\sum_{i,j}\langle\alpha|i\rangle\langle i|Q|j\rangle\langle j|\alpha\rangle=\sum_{i,j}c_i^*Q_{i,j}c_j. \tag{3.117}$$

其中$|i\rangle,|j\rangle$是A的本征矢, 也就是基矢. 上式正是$\langle\alpha|$对应的行矢与Q的矩阵, $|\alpha\rangle$的列矢的矩阵乘.

3.5.2 矩阵表示下的本征方程

按Dirac记号, 算符Q的本征方程表示为

$$Q|q\rangle=q|q\rangle. \tag{3.118}$$

在A表象下,

$$\sum_{i,j}|i\rangle\langle i|Q|j\rangle\langle j|q\rangle=\sum_i q|i\rangle\langle i|q\rangle. \tag{3.119}$$

比较两边同一个基矢$|i\rangle$的系数

$$\sum_j Q_{i,j}c_j=qc_i. \tag{3.120}$$

其中$c_j=\langle j|q\rangle$, 是$|q\rangle$的表示. 这正是矩阵的本征方程.

下面以自旋问题为例来说明。

选S_z表象，基矢为$|+\rangle,|-\rangle$. S_x的本征方程为

$$S_x|a\rangle=a|a\rangle. \tag{3.121}$$

利用S_x的矩阵表达式（3.98)(或泡利矩阵（3.112), 化为矩阵方程.

$$\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0, & 1\\ 1, & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}=a\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix} \tag{3.122}$$

可以化为齐次方程

$$\begin{pmatrix}-\lambda, & 1\\ 1, & -\lambda\end{pmatrix}\begin{pmatrix}c_1\\ c_2\end{pmatrix}=0 \tag{3.123}$$

其中$\lambda=a/(\hbar/2)$.

方程有非平庸解的条件为系数行列式等于零, 即久期方程. 解为$\lambda=\pm1$,对应本征值a有两个：$\hbar/2,-\hbar/2$; 将λ带回方程，并考虑到归一化要求$|c_1|^2+|c_2|^2=1$, 我们发现对应本征态分别为

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix},\quad \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-1\end{pmatrix}. \tag{3.124}$$

（这里其实也采取了一个'规范'：c_1,c_2取了实数解). 可以记作

$$|S_x,+\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle+|-\rangle) \tag{3.125}$$

和

$$|S_x,-\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle-|-\rangle). \tag{3.126}$$

前者就是3.69.

前面提到的假想实验: 一个自旋朝上(z方向)的粒子通过沿x方向设置的Stern-Galach装置. 我们会发现有一半机会测得$\hbar/2$, 一半机会$-\hbar/2$, 就是因为

$$|+\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|S_x,+\rangle+|S_x,-\rangle) \tag{3.127}$$

这说明: 不能把Hilbert空间里矢量等同于现实空间里的矢量.

对于处于$|+\rangle$态的自旋，测量S_x的期望值为$\frac{\hbar}{2}\frac{1}{2}+\frac{-\hbar}{2}\frac{1}{2}=0$. 也可以直接利用矩阵计算

$$\langle S_x\rangle=\langle +|S_x|+\rangle=(1,0)\frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}=0. \tag{3.128}$$

作为练习，可以试求S_y的本征矢与本征值.

3.6 Schrödinger方程及其矩阵形式

量子力学认为，系统的状态的时间演化满足Schrödinger 方程, 其最一般的形式如下：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha\rangle = \hat{H}|\alpha\rangle. \tag{3.129}$$

$\hat{H}$是哈密顿量算符。大家可以对比第一章学习过的薛定谔方程, 可以看到这相当于把波函数整体当作一个态矢量. 对波函数的操作换成了对态矢量的操作.

方程的左边可以看成是$(|\alpha(t+\Delta t)\rangle - |\alpha(t)\rangle)/\Delta t$乘以$i\hbar$. 所以反映的是态矢量会怎样旋转. 或者说其'旋转速度'由H对当时的状态的'操作'决定。

在A表象下它可以写成矩阵形式,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle i|\alpha\rangle = \langle i|\hat{H}|\alpha\rangle = \sum_j \langle i|\hat{H}|j\rangle\langle j|\alpha\rangle. \tag{3.130}$$

即

$$i\hbar\dot{c}_i = \sum_j H_{ij}c_j. \tag{3.131}$$