



中国科学技术大学

UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY OF CHINA

地址: 中国安徽省合肥市 电话: 0551-63602184 传真: 0551-63631760 网址: http://www.ustc.edu.cn

第四章 氢原子

氢原子在球坐标下的波函数可表示为

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

氢原子三个量子数:

n : 主量子数, 表示能量状态.

$$E = \frac{E_0}{n^2} \quad n=1, 2, 3, \dots$$

l 为角动量量子数, $l=0, 1, \dots, n-1$

m 为磁量子数, $m = -l, -(l-1), \dots, 1, \dots, l$

即 $n=1, 2, 3, 4$

对应 s, p, d, f

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad \hat{L}_z \psi_m = m\hbar \psi_m$$

ψ_m 是 \hat{L}_z 的本征函数, 本征值为 $m\hbar$.

$$\hat{L}^2 \psi_{lm} = l(l+1)\hbar^2 \psi_{lm}$$

ψ_{lm} 是 \hat{L}^2 的本征函数.

本征值是 $l(l+1)\hbar^2$

可以看到自旋算符 \hat{S}_z 与 \hat{L} 有极其相似的性质, 与第五章相联系

$r \rightarrow -r$

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad Y_l^m = (-1)^m Y_l^{-m}$$

$$R_{10} = 2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0} \quad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}$$

eg. 对波函数 $\psi = (r+x+y+z)f(r)$

进行测量, 求对应角动量本征值态

$$\hat{L}^2 = \frac{\hbar^2}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$\psi = (1 + \frac{x}{r} + \frac{y}{r} + \frac{z}{r}) f(r)$$

$$= R(r) \sum c_k Y_{lm}$$

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r}$$

$$Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\varphi} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left(\frac{x \pm iy}{r} \right)$$

$$\therefore \psi = r f(r) \left[\sqrt{4\pi} Y_{00} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} (Y_{1,-1} - Y_{1,1}) \right]$$

$$+ 2i \sqrt{\frac{3}{\pi}} (Y_{1,-1} + Y_{1,1}) + 2 \sqrt{\frac{3}{\pi}} Y_{10}$$

$$\propto Y_{00} + \sqrt{\frac{1}{6}} (1+2i) Y_{1,-1} + \sqrt{\frac{1}{6}} (1+2i) Y_{1,1}$$

$$+ \sqrt{\frac{4}{3}} Y_{10}$$

$$\sum c_l^2 = \frac{5}{6} \times 2 + 1 + \frac{4}{3} = 4$$

$$l = \begin{cases} 0 & \frac{1}{4} \\ 1 & \frac{3}{4} \end{cases} \quad m = \begin{cases} 0 & \frac{7}{12} \\ 1 & \frac{5}{12} \\ -1 & \frac{5}{12} \end{cases}$$

$$\hat{L}_z = m\hbar = \begin{cases} 0 & \frac{7}{12} \\ \hbar & \frac{5}{12} \\ -\hbar & \frac{5}{12} \end{cases}$$

$$\hat{L}^2 = l(l+1)\hbar^2 = \begin{cases} 0 & \frac{1}{4} \\ 2 & \frac{3}{4} \end{cases}$$

不同态电子可能位置, $r = n a_0$ (玻尔半径)

$$\bar{r} = \frac{a_1}{2Z} [3n^2 - l(l+1)]$$

$$\bar{r}^{-1} = \frac{Z}{n^2} \left(\frac{Z}{a_1} \right)$$

$$\bar{r}^2 = \frac{1}{2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] n^2 \left(\frac{a_1}{Z} \right)^2$$

跃迁选择定则 $\Delta m = \pm 1, \Delta m = 0$

$$\Delta l = \pm 1$$



eg 1. 假设粒子波函数形式为

$$\psi(x, y, z) = \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} z \exp(-\alpha(x^2 + y^2 + z^2))$$

证明粒子处于角动量本征态上。
并求 L^2 的本征值。

$$\psi(x, y, z) = \frac{\alpha^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{\pi}} r \cos\theta \exp(-\alpha r^2)$$

$$\begin{aligned} L^2 \psi(x, y, z) &= -\frac{\hbar^2}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) \psi \\ &= -\frac{2\sin\theta \cos\theta}{4r^2} \cdot -\hbar^2 \psi \\ &= 2\hbar^2 \cos\theta \psi = 2\hbar^2 \psi \end{aligned}$$

$$L^2 = 2\hbar^2$$

$$L_z \psi = 0, \quad L_z = 0$$

证明 ψ

$$\star L^2 = \frac{-\hbar^2}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right)$$

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi}$$

eg 2. 证明在 L_z 本征态上，角动量沿 z 方向或 θ 角的平均值为 $m\hbar \cos\theta$

$$\vec{n} = (\sin\theta \cos\phi, \sin\theta \sin\phi, \cos\theta)$$

$$L = \sin\theta \cos\phi L_x + \sin\theta \sin\phi L_y + L_z \cos\theta$$

$$\therefore \langle L \rangle = \cos\theta \langle L_z \rangle = m\hbar \cos\theta$$

eg 3. 求氢原子基态 $\Delta x, \Delta p_x$ ，验证不确定关系成立。根据波函数对称性。

$$\langle x \rangle = 0$$

$$\psi_0 = R_{10} Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot 2a_0^{-\frac{3}{2}} e^{-r/a_0}$$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \frac{1}{3} \langle r^2 \rangle = \frac{1}{3} \int_0^{+\infty} r^2 \left[e^{-r/a_0} \cdot 2a_0^{-\frac{3}{2}} \right]^2 r^2 dr \\ &= \frac{2}{3} \int_0^{+\infty} r^4 e^{-\frac{2r}{a_0}} \frac{1}{a_0^3} dr = \int_0^{+\infty} e^{-t} \cdot t^4 \cdot \frac{1}{3} a_0^2 dt \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{3} a_0^2 \int_0^{+\infty} t^4 e^{-t} dt$$

$$= \frac{1}{3} a_0^2 \cdot \Gamma(5) = \frac{1}{3} \times 4! \times a_0^2 = a_0^2$$

$$\langle x \rangle = 0$$

$$\langle p_x^2 \rangle = 0$$

$$\langle p_x \rangle = \frac{1}{3} \langle p^2 \rangle = -\frac{1}{3} \hbar^2 \int \frac{\partial}{\partial r} \psi \cdot r \sin\theta \, d\omega \, dr$$

$$= -\frac{1}{3} \hbar^2 \cdot \frac{4\pi}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \dots$$

$$= \frac{\hbar^2}{3a_0^2} \Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{\sqrt{3}} > \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{\sqrt{3}} > \frac{\hbar}{2}$$

eg 3. 基态氢原子处于经典不允许区域的概率?

$$E_k - V = -\frac{\hbar^2}{2\mu a_0^2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} < 0$$

$$r > 2a_0$$

$$\int_{2a_0}^{+\infty} R_{10}^2 r^2 dr = \int_{2a_0}^{+\infty} 4a_0^{-3} r^2 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr$$

$$= \int_{2a_0}^{+\infty} \frac{4t}{a_0} e^{-t} da_0 t$$

$$= 2 \int_{2a_0}^{+\infty} t e^{-t} dt$$

$$= 2 \left[-e^{-t} t - e^{-t} \right]_{2a_0}^{+\infty} = 2e^{-2}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} p e^{-p^2} dp$$

$$\int \sin\theta \, d\omega \, dr$$



中国科学技术大学

UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY OF CHINA

地址:中国安徽省合肥市 电话:0551-63602184 传真:0551-63631760 网址:http://www.ustc.edu.cn

eg4. 假设氢原子 $t=0$ 时处于

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200} - \psi_{100})$$

计算 $\langle r \rangle$ 的时间演化

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200} e^{-iE_2 t/\hbar} - \psi_{100} e^{-iE_1 t/\hbar})$$

$$\langle r \rangle = \int r \psi \psi^*$$

~~$$\int_0^{a_0} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi r^3 \sin\theta \cos\theta \frac{1}{2} d\theta d\phi dr$$~~

$$\int r (\psi_{200}^2 + \psi_{100}^2 - 2\cos\omega t \psi_{100}\psi_{200}) dr d\theta d\phi$$

~~$$\frac{1}{2} \int r^3 \left(\frac{4}{a_0^3} e^{-\frac{r}{a_0}} + \frac{1}{8} \frac{1}{a_0^3} \right)$$~~

$$= \left(\frac{15}{4} + \frac{32\sqrt{2}}{81} \cos\omega t \right) a_0 \quad \omega = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$$

核心在于此时在没有学后来学行的情况

下. 仍是用 $\langle r \rangle = \int r \psi \psi^*$

$$\langle \hat{p} \rangle = \int \hat{p} \psi \psi^*$$

相当于利用第三章知识解决具体问题.



第五章. 自旋.

如第三章知道, $\psi(x)$, $\psi(y)$ 都可表示状态
很不方便. 因此引入狄拉克符号 $|\psi\rangle$.

右矢. 表示一个抽象的波函数.

相当于将一个波函数映射为一个向量.

波函数. 狄拉克符号

本征态叠加 基矢量线性加

共轭相乘 共轭转置相乘.

$$\psi = \sum c_n \psi_n. \quad |\psi\rangle = \sum c_n |n\rangle$$

$$\langle\psi| = \langle\psi|$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1$$

eg. 态矢量的矩阵表示.

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\langle\psi| = \frac{1}{\sqrt{2}}(\langle 0| - i\langle 1|) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\langle\psi|\psi\rangle = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1.$$

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

直积态: 对于两个 H_1, H_2 , 拼接希尔伯特空间为 $H_1 \otimes H_2$.

$$|0_A\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1_A\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad |0_B\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|0_A\rangle|0_B\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 * \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 * \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{pmatrix} \quad |1_B\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|0_A, 1_B\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|1_A, 0_B\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$|1_A, 1_B\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$|\psi_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_A\rangle + i|1_A\rangle)$$

$$|\psi_B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0_B\rangle - i|1_B\rangle)$$

的直积态

$$|\psi_A\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$|\psi_B\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$|\psi_A, \psi_B\rangle = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{2}(|0_A, 0_B\rangle - i|0_A, 1_B\rangle + i|1_A, 0_B\rangle + |1_A, 1_B\rangle)$$

二. 电子自旋的发现.

~~1927~~ 塞曼效应. 由于量子数 m .

不同 m 在磁场中能量不同. 发生能级分裂.

1927年 SG 实验. (斯特恩 - 盖拉赫).
基态氢原子 $l=0, m=0$. 在磁场中不应发生分裂. 但观察到两束磁谱线. 因此电子具有内禀角动量. 即为自旋.

S 在任意方向只有两个取值 $S_z = \pm \frac{\hbar}{2}$.

定义新角动量: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$
物理量 \downarrow 轨道角动量 \downarrow 自旋角动量.

$$j^2 = s^2 + l^2 + 2sl.$$

$$j^2 = \hbar^2 j(j+1), \quad j_z = m_j \hbar$$

$$m_j = -j, -j+1, \dots, j.$$

$$j = l+s, l+s-1, \dots, |l-s|.$$

~~对于电子~~
 $2sH$
 L_j

l	0	1	2	3
L	S	P	D	F





中国科学技术大学

UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY OF CHINA

地址: 中国安徽省合肥市 电话: 0551-63602184 传真: 0551-63631760 网址: http://www.ustc.edu.cn

3. 原子磁矩

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_s + \vec{\mu}_l = -\frac{\mu_B}{\hbar} (g_l \vec{l} + g_s \vec{s})$$

$$g_l = 1, g_s = 2$$

由于存在进动, 只有 J 方向有意义

$$\vec{\mu} = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \vec{J}$$

$$g = 1 + \frac{J^2 S^2 - L^2}{2J^2}$$

朗道 g 因子

4. 自旋算符和泡利矩阵:

可以发现 S_x 与 S_y 具有极其相似的性质
引入自旋算符 \hat{S}_x 作用到波函数上:

$$S_x \text{ 本征值 } s = s(s+1)\hbar, s \text{ 只等于 } \frac{1}{2}$$

$$m_s = -s, \dots, 0, \dots, s, m_s = \pm \frac{1}{2}$$

$$S_z \text{ 本征值为 } \pm \frac{\hbar}{2}$$

\hat{S}_x, \hat{S}_z 的共同本征态构成自旋表象:

两个本征态基向量分别表示为 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x$$

泡利算符可表示为矩阵形式:

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

本征值为 ± 1 . 即求矩阵本征值

eg. 求 $\hat{\sigma}_y$ 算符的本征态和本征值.

并给出 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$ 上的 \hat{S}_y 期望值和几率.

$$\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} : |\lambda - \hat{\sigma}_y| = \begin{vmatrix} \lambda & i \\ -i & \lambda \end{vmatrix}$$

$$\lambda^2 - 1 = 0 \quad \lambda = \pm 1$$

~~$$(\lambda - \hat{\sigma}_y)\alpha = \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0$$~~

~~$$\hat{\sigma}_y \alpha = \alpha$$~~

$$\begin{cases} -iy = x \\ ix = y \end{cases} \quad |\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

$$|\beta\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha |\uparrow\rangle + \alpha |\downarrow\rangle - i\beta |\uparrow\rangle + i\beta |\downarrow\rangle)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} [(\alpha - i\beta) |\uparrow\rangle + (\alpha + i\beta) |\downarrow\rangle]$$

几率均为 $\frac{1}{2}$.

即将量子态用非正交基表示, 此处

不满足具体物理量表象

只是矩阵运算.

4(2) 自旋算符在任意方向投影的波函数

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{n} = \hat{\sigma}_x n_x + \hat{\sigma}_y n_y + \hat{\sigma}_z n_z$$

$$= \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta(\cos\varphi - i\sin\varphi) \\ \sin\theta\cos\varphi & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\theta & 2\sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$



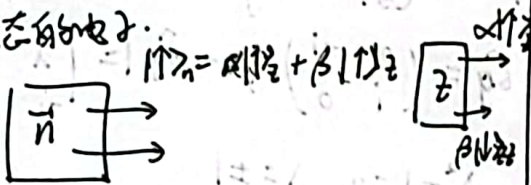
本征值: ± 1 .

本征态: $|\uparrow\rangle_n = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix}$
 $|\downarrow\rangle_n = \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \cos\frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix}$

5. 梯度磁场下电场偏转与SG装置.

通过梯度磁场偏转, 制备不同.

自旋态的电子.



6. 磁场下电子自旋的进动和自旋转动

算符

$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix}$. ω 称为拉莫尔频率.

$\langle \hat{S}_x \rangle = \langle \psi(t) | \hat{S}_x | \psi(t) \rangle$

$= \frac{\hbar}{2} \frac{1}{2} (e^{i\omega t}, e^{-i\omega t}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix}$

$= \frac{\hbar}{4} (e^{i\omega t}, e^{-i\omega t}) \begin{pmatrix} e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} \end{pmatrix}$

$= \frac{\hbar}{2} \cos 2\omega t$

7. Bloch 球与自旋动力学

自旋空间中每个量子态对在环面上一个点

\vec{n} 与 $|\uparrow\rangle_n$ 一一对应.

系统在 Hamiltonian 控制下演化对量子操作 $\exp(-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{\sigma} \cdot \vec{n})$

其意义将量子态沿轴由 \vec{n} .

转动 α 角.

$|\uparrow\rangle_n = \exp(-\frac{i}{\hbar} \alpha \vec{\sigma} \cdot \vec{n}) |\uparrow\rangle_0$

8. 粒子全同性, 波函数对称性及泡利不相容原理

不相容原理

原子内的多电子波函数满足交换反对称自旋为半整数.

LS 耦合 (双电子)

$S = s_1 + s_2$, 或 $s_1 - s_2$. 也可能是 0. 总自旋角动量. (费米子).

$S^2 = S(S+1)\hbar^2$. $M_S = S, S-1, \dots, -S$

$L = l_1 + l_2$

总轨道角动量: $L = l_1 + l_2, (l_1 + l_2 - 1), \dots, |l_1 - l_2|$

$L^2 = L(L+1)\hbar^2$. $M_L = L, L-1, \dots, -L$

$L + S = J$ 总角动量

和 $J = L + S, \dots, |L - S|$

$2S+1$

L, J . L, S 必须为偶数!

eg. 氢原子外有两个电子, $(n, l), (l, s)$

LS 耦合, 求电子可能状态

若 $(1s)(2s)$, 求电子可能状态.

$S = s_1 + s_2 = 1$ 或 0 . \therefore 电子不能全同

$\therefore \vec{s}_1 + \vec{s}_2 = 0, S = 0, L = 0$

$^2S_1, ^1S_0$

$(1s)(2s)$ 状态下有 1S_0

$S = 1, ^3S_1$



中国科学技术大学

UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY OF CHINA

地址:中国安徽省合肥市 电话:0551-63602184 传真:0551-63631760 网址:http://www.ustc.edu.cn

第六章. 量子比特

6.1 二能级系统.

二能级系统能用一组完备正交基表示

$$|\psi\rangle = c_1|1\rangle + c_2|0\rangle, |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$$

与自旋类比. $|1\rangle = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix}$

日决定在z轴上的投影.

方位角 ϕ 决定了几率幅的相位差

6.2 二能级系统及其操控.

二能级系统与演化能用么正算符表示
对应于 Bloch 球上的转动.

$$\exp(-i\frac{\sigma}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma})$$

空间中任意算符可用泡利矩阵分解:

Hadamard 算符:

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\sigma}_x + \hat{\sigma}_z)$$

6.3 纯态、混合态与密度算符.

密度算符 $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$

$\text{Tr}(\rho^2) = 1$. 纯态. 记判定即可.

$\text{Tr}(\rho^2) = 0$. 最大混合态.

6.4 量子比特:

~~H 对基态和混合态.~~

✖

H: 基态、激发态等限制.

X: 比特反转.

Z: 添加 π 相位. Y: 添加 $\frac{\pi}{2}$ 相位.

物理实现: (以光子偏振态为例)

半波片: $\begin{pmatrix} \cos 2\gamma & \sin 2\gamma \\ \sin 2\gamma & -\cos 2\gamma \end{pmatrix}$

$\frac{\pi}{4}$ 波片: $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 - i\cos 2\gamma & -i\sin 2\gamma \\ -i\sin 2\gamma & 1 + i\cos 2\gamma \end{pmatrix}$

单量子比特操作对应 Bloch 球上的操作

$$R(\eta) = \exp(-i\frac{\eta}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma})$$

用 $\hat{U} = \hat{U}_{\text{prep}} \hat{U}_{\text{map}} \hat{U}_{\text{prep}}$

可实现任意操作

纯态叠加态: $|\psi\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|0\rangle$

尽管由一定概率得到 $|1\rangle$ 或 $|0\rangle$.

但本身是确定物理状态.

混合态: 以经典概率处于某些确定量子态.

最大混合态可用任意一对正交态等概率混合

量子不可克隆定理: 单个未知量子态不可精确克隆.



第七章: 量子信息

7.1 EPR佯谬, 量子纠缠与Bell不等式

实在性: 不干扰系统前提下,

可以确定物理量的值, 一定有一对象具物理实在性.

定域性: 事件与信息只能不超过光速的传播

波函数不对物理实在有完备性描述:

量子纠缠:

考虑2电子自旋系统: 有量子态 $|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$

可用 $|\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ 表示:

$$= (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)_A (y|0\rangle + \delta|1\rangle)_B$$

$$= \begin{pmatrix} \alpha y \\ \alpha \delta \\ \beta y \\ \beta \delta \end{pmatrix}$$

如果不能写成直积形式:

则存在量子纠缠.

eg. $\alpha|100\rangle + \beta|111\rangle$

$$= a|0\rangle + b|1\rangle \otimes (c|0\rangle + d|1\rangle)$$

$$= ac|00\rangle + bc|01\rangle + ad|10\rangle + bd|11\rangle$$

$$ac = \alpha, \beta = bd, ad = 0, bc = 0$$

无解, 所以无法写成直积态, 存在量子纠缠.

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |01\rangle + |10\rangle + |11\rangle)$$

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

纠缠态严格数学定义:

当且仅当 $\rho = \sum p_i |\psi_i\rangle_A \langle\psi_i| \otimes |\psi_i\rangle_B \langle\psi_i|$ 不能成立 (不考).

注意: 纯态的即可

Bell不等式:

出现波函数的不完备性, 是因为忽略了
一些隐变量(假设),

对局域隐变量

$$|P(a,b,c) - P(a,b,c)|$$

CHSH不等式:

$$S = P(a,b) + P(a,b') + P(a',b) - P(a',b')$$

$$\leq 2 \quad (\text{局部隐变量})$$

$\leq 2\sqrt{2}$ (量子理论)

实验验证后, 量子理论正确

量子测量与纠缠:

最初先发生纠缠, 然后发生退相干

实验制备纠缠:

两量子比特从直积态制备纠缠态

7.3 量子信息

1. 量子通信及量子密钥分发

~~量子密钥分发~~ 量子密钥分发 + 一次一密

无条件安全的保密通信.

BB84方案

编码状态集合: 光子四种偏振态

~~$|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$~~

$$|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$$

组内两态正交, 每一组在另一组上投影相等

对应经典密钥依次为 $\langle 0|, \langle 1|, \langle 2|, \langle 3|$.

$\{|0\rangle, |1\rangle\}$ 测量方式:

+ $|0\rangle, |1\rangle$ 对应 $\hat{\sigma}_z$

- $|2\rangle, |3\rangle$ 对应 $\hat{\sigma}_x$



通信协议:

Alice 将一串量子比特串
 $\{s_1, s_2, \dots, s_n\}$ 传给 Bob
 Bob 随机测量.

Alice 告诉 Bob 哪些测量基正确.
 并未公布测量结果, 但已经得到密钥.

7.3 量子隐形传态.

假设 Alice Bob 共享一对纠缠

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

Alice 待传输: $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$

三体系统状态为 $|\psi\rangle_{23}$

$$= (\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

用 Bell 基展开

$$|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

$$|\Phi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$$

分掉贝尔基即可得到待传输粒子
 状态 (Alice 需通过经典信道告知 Bob)

量子纠缠交换:

$$|\psi^+\rangle_{23} \Leftrightarrow |\Phi^+\rangle_{14}$$

$$|\psi^-\rangle_{23} \Leftrightarrow |\Phi^-\rangle_{14}$$

$$|\psi^+\rangle_{23} \Leftrightarrow |\Phi^-\rangle_{14}$$

$$|\psi^-\rangle_{23} \Leftrightarrow |\Phi^+\rangle_{14}$$

(这部分我也没听懂)

7.4 量子计算.

量子操作可以以类二进制逻辑门运行.

三比特逻辑门可以以任意精度逼近

一个公正操作

通用量子计算机流程

① 初态 $|0\rangle|0\rangle \dots |0\rangle$

② 在初态上进行一系列公正演化.

③ 在 $|0\rangle|1\rangle$ 基上测量.

④ 对结果进行验证

量子逻辑门举例:

两比特量子逻辑门: CNOT 受控非门

$$|00\rangle \rightarrow |00\rangle$$

$$|01\rangle \rightarrow |01\rangle$$

$$|11\rangle \rightarrow |10\rangle$$

$$|10\rangle \rightarrow |11\rangle$$

量子 CNOT 门: 可生成纠缠或去纠缠

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)_A \text{ CNOT } (|0\rangle)_B$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) \text{ 纠缠态}$$

目标比特也可改变控制比特

$$(|0\rangle + |1\rangle) \text{ CNOT } (|0\rangle - |1\rangle)$$

$$= 0(|0\rangle - |1\rangle) + (-|0\rangle + |1\rangle)$$

$$= (|0\rangle - |1\rangle)(|0\rangle - |1\rangle)$$

(Z 门: 受控相位门.

$|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle$ 都不变

$$|11\rangle \rightarrow -|11\rangle$$

