论文

量子统计力学、量子概率论与量子特征函数

顾雁*

中国科学技术大学近代物理系, 合肥 230026

*联系人, E-mail: ygu@ustc.edu.cn

收稿日期: 2019-10-25; 接受日期: 2020-01-02; 网络出版日期: 2020-04-20

国家自然科学基金(编号: 11775210)资助项目

摘要 本文讨论“量子统计力学”与数学学科中的一个新兴分支“量子概率论”之间的关系, 并从量子统计力学的观点, 介绍如何把经典概率论中广泛使用的“特征函数”推广到量子概率论中去. 由于每个量子力学系统的“基本力学量”必须遵守特定的对易关系, 为了满足这一特殊要求, 我们将经典概率论中的“特征函数”推广成一个归一非负定的“群上函数”. 我们把这种“群上函数”称之为“量子特征函数”, 并阐明了物理学家在量子统计力学中习惯采用的“密度矩阵”表示, 是可以用“量子特征函数”表示来替代的. 本文介绍了在量子统计力学的理论研究中, 采用“量子特征函数”这一新的数学表示时所显示的某些优越之处. 作为与“密度矩阵”表示进行对比的实例, 本文讨论了在“特征函数”表示下求解描述量子开系统不可逆演化的主方程, 确定量子开系统在给定环境下的“指针态基”, 以及如何将“密度矩阵”在“指针态基”上展开等问题. 特别是, 本文具体给出了“量子光学主方程”的显式解, 求出该方程的稳态解, 证实了此时的“指针态基”就是相干态. 此外, 我们还在“特征函数”表示下, 讨论了量子布朗运动的Caldeira-Legget主方程及其Lindblad型的推广.

关键词 量子统计力学的群论形式, 量子特征函数, 量子开系统的主方程

PACS: 03.65.Yz, 03.65.Ud, 03.67.Mn

1 引言

物理学中的“统计力学”, 起源于19世纪50年代由Clausius, Maxwell以及Boltzmann建立的“气体分子运动论”. 当时, 他们为了描述数目巨大且具有不确定位置和动量的粒子的运动, 不得不采用在“牛顿力学”中完全陌生的“概率”的概念. 其后, Gibbs引入了更有效的, 力学系统在相空间中概率分布的“系综描述”, 并成功阐明了宏观系统的“系综描述”与“唯

象的热力学描述”间的联系. 到今天, 这种看来相当抽象的对力学系统状态的数学表示, 已成为我们研究“统计力学”的基本数学工具^[1].

事实上, 概率论作为研究大量“或然事件”的规律性的数学学科, 早在17世纪中叶便已出现. 其研究结果和研究方法, 被广泛地应用于各个领域的统计学、误差理论、信息论等众多学科中, 而“统计力学”无疑可看成是概率论在物理学领域内, 描述自然规律时的又一应用. 值得指出的是, 早期的概率

引用格式: 顾雁. 量子统计力学、量子概率论与量子特征函数. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2020, 50: 070002

Gu Y. Quantum statistical mechanics, quantum probability and quantum characteristic function (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2020, 50: 070002, doi: 10.1360/SSPMA-2019-0365

论的各种应用, 都是按所研究对象的性质和对“概率”这一概念的直观理解, 各自建立自己的形式体系. 直到20世纪30年代, 才由Kolmogorov^[2]阐明了概率论与测度论间的联系, 使得概率论作为一门数学学科, 有了统一的公理体系^[2].

20世纪30年代在物理学领域里, “概率”又以出乎意料的方式出现在人们刚建立的描述微观世界的量子力学中. Born^[3]最早对量子力学中表示量子态的“波函数”给予了“几率解释”. 其后von Neumann^[4]提出用Hilbert空间中的“密度矩阵”描述“量子系综”, 从而建立了包含观测理论的“量子统计力学”的数学基础. 尽管从物理上看, 在“量子统计力学”中存在着两种具有截然不同意义的“概率”: 一种反映的是, 对系统状态本身描述的不确定性; 另一种则反映的是, 对确定的量子态进行观测时, 由于海森堡不确定关系而产生的观测结果的不确定性. 但从数学上看, 它们都是“经典概率论”中的“概率”(大量或然事件中某类事件发生的相对频度), 并无量子与经典之分. “量子概率论”作为数学学科的一门新的分支, 得到数学界的公认是在20世纪末^[5]. 这是因为数学家们首先要回答的问题是, 从“量子统计力学”模型中得到的各种统计数据, 是否都能从“经典概率论”的某种模型中得到(在物理学中, 相应的问题就是“潜参量”的存在问题). 由于“量子概率论”的公理系统很容易按照von Neumann的“量子统计力学”体系构造出来, 数学家们很快就搞清楚了“量子概率论”与“经典概率论”之间的关系, 它们就像“黎曼几何”之于“欧氏几何”.

进入21世纪后, 随着人们掌控微观系统实验技术的进展, “量子通讯”和“量子计算”开始成为物理学领域中的热点研究课题, 这大大加强了数学家们对“量子概率论”和“量子信息论”研究的兴趣, 与之有关的工作也随之大量出现^[6]. 从物理学发展的历史看, 正如“引力理论”与“宇宙学”的发展得益于数学家们已经建立的“黎曼几何”, 可以期待, “量子概率论”的出现无疑将有助于“量子统计力学”基础理论研究的发展.

最后我们还需要强调, “统计规律”和“动力学规律”实质上是两种不同类型的自然规律. 从数学的角度看, “测度”(概率)本身的定义并不涉及“拓扑”(邻

域、流形、度规等), 故而“统计规律”是一种具有“非定域”特征的规律, 而“动力学规律”的基本特征却是“定域性”以及由此导致的“因果原理”. 所以, “统计力学”无疑应该建立在一个能使“统计”和“动力学”两种规律相容的理论框架之中.

本文首先讨论作为数学学科的“概率论”与作为物理学科的“统计力学”之间的关系, 特别致力于阐明, “经典统计力学”和“量子统计力学”分别是“经典概率论”和“量子概率论”中具有何种特征的数学模型. 在第3节中, 我们讨论如何把经典概率论中的“特征函数”推广到“量子统计力学”中去, 说明将“量子特征函数”定义为一个“群上函数”的理由, 并给出了“群上函数”表示与通常的“Hilbert空间算符”表示间的转换关系. 在第4节中我们指出, 如果用“量子特征函数”这一新的数学表示来替代量子统计力学中传统的“密度矩阵”表示, 在处理复杂量子系统的约化、量子开系统的不可逆演化以及密度矩阵在“指针态基”上的展开等问题上, 都会较传统方法更为有效和简便. 作为实例之一, 本文给出了求解量子光学主方程的显式解的具体过程, 证实了由该主方程确定的“指针态基”是谐振子的相干态. 另外, 我们还讨论了量子布朗运动的Caldeira-Leggett主方程及其Lindblad型的推广. 在第5节的结语中, 我们强调了本文的贡献在于阐明了“物理学中的力学”与“数学中的统计学”间的关系, 为使两者有效结合, 需要选择一个合适的数学框架.

2 统计力学作为概率论的特定数学模型

2.1 经典统计力学与经典概率论

首先简单叙述一下经典统计力学的系综描述. 对于一个给定的哈密顿力学系统, 人们用相空间中点的位置 (p, q) 表示系统的动力学状态. 在经典统计力学中, 由于初始条件的不确定, 系统状态需用相空间中的系综分布 $\rho(p, q)$ 来表示. 此时, 系统力学量 $F(p, q)$ 的期望值为 $\bar{F} = \int F(p, q)\rho(p, q)dpdq$, 而系综分布 $\rho(p, q)$ 在相空间中的运动则由刘维方程 $(\partial\rho/\partial t)_{p,q} = -\{\rho, H\}$ 给出, 这里 H 是系统的哈密顿量, $\{, \}$ 表示泊松括号.

需要注意的是,在这一理论体系中,人们引入了一个从“经典力学”向“统计力学”过渡时必须引入的基本概率假定,即所讨论的系统的状态处在相空间体积元 $d p d q$ 中的概率须表示成 $\rho(p, q) d p d q$. 事实上,正是由于在哈密顿力学中相体积不变原理(刘维定理)成立,系综的动力学演化才可用系综分布 $\rho(p, q)$ 的演化来表示. 因此,从理论上讲,我们可以认为Gibbs的系综描述之所以取得成功,是因为他在哈密顿力学的基础上引入了一个与动力学规律相容的几率假定¹⁾.

另一方面,在经典概率论里,人们讨论的对象是一个抽象的样本空间 $\Omega\{\omega\}$. 可能发生的“事件”对应于样本空间中的一个可测子集,而“事件”发生的“概率”则给出定义在全体可测子集上的某个正测度 μ . 用 $B = \{A_j \subseteq \Omega, j \in J\}$ 表示 Ω 中由全体可测子集 A_j 组成的集合, μ 是定义在 B 上的有限正测度,且满足 $\mu(\Omega) = 1$,则 $\{\Omega, B, \mu\}$ 称作一个“概率空间”. Ω 上的可测函数 $X(\omega)$ 即是随机变量,它的概率分布函数为 $F(x) = \int_{X(\omega) \leq x} d\mu(\omega)$. 一个最常见的例子是把一个 n 维的欧氏空间 $\Omega = \mathbf{R}^n$ 看作样本空间. 此时,从测度论角度看,可以定义无数种测度,而通常使用的“体积元”则是在该空间上的对平移与转动变换的“不变测度”,它在一定意义下是唯一的.

从上面的讨论可知,为了在经典力学的基础上引入“统计”概念,最关键的问题是如何选择某种合适的“测度”. Gibbs的系综描述是在哈密顿力学的基础上采用了具有正则结构的相空间作为样本空间,并引入了一个动力学意义下的“不变测度”,从而以最佳方式完成了“统计规律”与“动力学规律”间的统一描述.

2.2 量子统计力学与量子概率论

依照von Neumann^[4]建立的“量子统计力学”的形式体系,一个给定量子力学系统的状态用Hilbert空间 $\mathcal{H}$ 中的射矢(Ray)表示,相应的量子系综用 $\mathcal{H}$ 上的密度矩阵 ρ 表示,可观测量则用 $\mathcal{H}$ 上的自伴算子 $\mathbf{X}$ 表示. 令 $\mathcal{H}$ 上的全体投影算符为 $\mathcal{P}(\mathcal{H})$,且自伴算子 $\mathbf{X}$ 有谱分解 $\mathbf{X} = \int \lambda d\mathbf{E}(\lambda)$, $\mathbf{E}(\lambda) \in \mathcal{P}(\mathcal{H})$,

则 $\mathbf{X}$ 的期望值为 $\langle \mathbf{X} \rangle = \text{Tr}\{\rho \mathbf{X}\} = \int \lambda \text{Tr}\{\rho d\mathbf{E}(\lambda)\}$. 当系统的动力学演化由哈密顿算符 $\mathbf{H}$ 确定时,密度矩阵 ρ 的运动方程为 $\partial \rho / \partial t = i[\rho, \mathbf{H}] / \hbar$. 此外,为了描述微观量子系统在被观测过程中发生的变化,von Neumann^[4]还给出了一个由“观测”导致“波包坍缩”的唯象理论.

从上面的讨论可知,von Neumann在他的理论中,实际上已经建立了一个与“经典概率空间” $\{\Omega, B, \mu\}$ 相对应的“量子概率空间” $\{\mathcal{H}, \mathcal{P}(\mathcal{H}), \rho\}$,因而完全可以在这个基础上建立“量子概率论”. 但从数学的角度看,“量子统计”与“经典统计”最基本的差异是前者存在着“互不相容”的可观测量及复合系统的“纠缠”量子态,而这些特征都与可观测量的代数结构有关. 因此,逻辑上更合理的公理体系不是首先引进一个由波函数组成的态空间,把可观测量用该态空间上的算符来表示,而是先定义一个抽象的“可观测量代数”,并用定义在该代数上的“正线性泛函”表示量子态,然后再引入它们在某个Hilbert空间 $\mathcal{H}$ 中的算符表示.

下面我们简单地叙述一下在von Neumann的量子力学形式体系的基础上建立的“量子概率论”的形式体系^[5]. 数学家们注意到,在von Neumann的形式体系中,用来表示“可观测量”的全体有界算符 $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ 构成一个 C^* 代数,而对任意算符 $\mathbf{a} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ 及密度矩阵 ρ , $\varphi(\mathbf{a}) = \text{Tr}\{\rho \mathbf{a}\}$ 是定义在该代数上的一个满足 $\varphi(\mathbf{I}) = 1$ 的正线性泛函,因而可以直接构造一个“代数概率空间” $\{\mathcal{A}, \varphi\}$. 这里 $\mathcal{A}$ 是任一具有单位元 $\mathbf{I}$ 的抽象的 C^* 代数, φ 是定义在 $\mathcal{A}$ 上满足 $\varphi(\mathbf{I}) = 1$ 的正线性泛函. 人们把 φ 称作 $\mathcal{A}$ 上的一个“态”,把 $\mathcal{A}$ 中的厄米元 $\mathbf{a} = \mathbf{a}^*$ 称作“随机变量”,它在 φ 态下的期望值定义为 $\langle \mathbf{a} \rangle = \varphi(\mathbf{a})$. 于是,前面提到的量子概率空间便可看成是代数概率空间 $\{\mathcal{A}, \varphi\}$ 在Hilbert空间 $\mathcal{H}$ 上的一个表示(由给定的 φ 构造出 C^* 代数 $\mathcal{A}$ 在 $\mathcal{H}$ 上的一个表示被称作“GNS构造”)^[7]. 采用这一形式体系的一个显然优点是,当 $\mathcal{A}$ 是一个交换代数时,我们得到的就是一个“经典概率论”的模型. 例如,设 $\mathcal{A}$ 是由定义在数值线 $\mathbf{R}$ 上的全体有界复连续函数 $C(\mathbf{R})$ (按函数的乘法和

1) 如果采用位置 q 和速度 $\dot{q}$ 描述系统的状态,用 $\rho(q, \dot{q})$ 表示系综在 $(q, \dot{q})$ 空间中的分布,则系综的动力学演化将不能用 $\rho(\dot{q}, q, t)$ 的演化来表示.

加法)组成的 C^* 代数, μ 是定义在 R 的Borel子集上的概率测度. 对任一 $f \in C(R)$, 定义 $C(R)$ 上的一个线性泛函 $\varphi_\mu(f) = \int_R f(x) d\mu(x)$, 则 φ_μ 是 $C(R)$ 上的一个“态”, $\{C(R), \mu\}$ 是一个可交换的代数概率空间.

现在我们来谈“量子统计力学”与“量子概率论”间的关系. 这里首先要指出的是, 当年von Neumann在他的《量子力学的数学基础》(*Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*)一书中, 只是提供了一个一般性的数学框架, 并未讨论需添加怎样的条件才能使该数学框架更确切地描述物理学家实际研究的量子系统的动力学特征.

上一节中我们提到, 在“经典统计力学”中, Gibbs把具有正则结构的“相空间”作为样本空间是顺利地实施系综描述的关键. 因此, 为了使“量子概率论”能有效地应用于“量子统计力学”, 该理论中用来表示“可观测量代数”的 C^* 代数 $\mathcal{A}$ 无疑应具备某种能反映物理系统动力学特征的特殊结构. 我们注意到, 每个量子物理系统都可用它的一组基本力学量来描述, 而决定其动力学特征的正是这些力学量之间的对易关系. 在文献[8]中作者指出了这类对易关系与数学中李代数的李括号间的联系(在经典力学中, 与对易关系相对应的表示式就是泊松括号, 详见文献[9]). 例如, 自旋算符 $\mathbf{s}$ 满足的对易关系 $[s_x, s_y] = i s_z$ 显然源自李代数 $su(2)$, 而正则变量 (q, p) 间的对易关系 $[q, p] = i\hbar$ 则源自一个三维的实李代数 $\mathcal{W}(1)$. 用 $a_1 = ip$, $a_2 = iq$, $a_3 = i\hbar$ 表示 $\mathcal{W}(1)$ 的一组基, 则 $\mathcal{W}(1)$ 的李括号为

$$[a_1, a_2] = a_3, [a_1, a_3] = 0, [a_2, a_3] = 0.$$

对于具有 n 对正则变量的力学系统, 相应的 $2n+1$ 维李代数用 $\mathcal{W}(n)$ 表示, 由它生成的李群用 $H(n)$ 表示, 称作Heisenberg-Weyl群^[10]. 在文献[8]中, 我们讨论了这类由量子系统的基本力学量生成的李群. 由于这类李群反映了量子力学系统的动力学特征, 我们仿照“经典统计力学”中的术语, 把它们称作力学系统的“相群”.

我们的结论是, 考虑到“统计”法则应与所研究系统的动力学特征相容的要求, “量子统计力学”中的“可观测量代数”不应该一般地以 C^* 代数来表示(事实上, 为了表示“无界”力学量, 如位置和动

量等, “可观测量代数”也不可能用“有界”的 C^* 代数来表示). 一个合理的构造“量子统计力学”中的“可观测量代数”的途径是, 从系统的“基本力学量”的对易关系出发, 先构造出某个李代数, 然后把该李代数生成的“通用包络代数”(其定义见文献[11])作为“可观测量代数”. 在下面一节中, 我们将给出一个更简单的“量子统计力学”中的“可观测量代数”与“量子态”的数学表示, 即用量子系统的“相群”上“具有有界支集的广义函数”来表示“可观测量代数”, 用“相群”上的特征函数来表示系统的“量子态”.

3 量子力学的群论形式与量子特征函数

为了阐明如何将人们惯用的量子统计力学的数学表示(Hilbert空间 $\mathcal{H}$ 中的“密度矩阵”和“厄米算符”)转换成“群上函数”表示, 我们来讨论一个一维空间中的单粒子系统. 该系统有一对正则变量 $\mathbf{q}$ 和 $\mathbf{p}$, 它们被表示成 $\mathcal{H}$ 中的厄米算符, 满足对易关系 $[\mathbf{q}, \mathbf{p}] = i\hbar$.

引入Heisenberg-Weyl群 $H(1)$ 在 $\mathcal{H}$ 中的一个不可约酉表示

$$g \rightarrow \mathbf{U}(g) = e^{i(x\mathbf{p} + y\mathbf{q} + z\hbar)}, \quad g \in H(1), \quad (1)$$

其中, $\{(x, y) \in \mathbb{R}^2, 0 \leq z < 2\pi/\hbar\}$ 表示群元 $g \equiv e^{ix a_1 + iy a_2 + iz a_3}$ 在 $H(1)$ 中的一个正则坐标. 设系统的量子态用密度矩阵 ρ 表示, 则我们可在群 $H(1)$ 上定义一个与 ρ 一一对应的特征函数

$$\varphi(g) = \text{Tr}[\rho \mathbf{U}(g)] = e^{iz\hbar + v(x, y)}, \quad (2)$$

其逆映射为 $\rho = \int_{H(1)} \varphi(g) \mathbf{U}^\dagger(g) dg$, 这里 $dg = (\hbar/2\pi)^2 dx dy dz$ 是 $H(1)$ 上的一个双不变Haar测度^[8-10].

定义微分算符

$$\begin{aligned} D_{,x} &= \frac{\partial}{\partial x} - i\hbar y/2, & D_x &= \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar y/2, \\ D_{,y} &= \frac{\partial}{\partial y} + i\hbar x/2, & D_y &= \frac{\partial}{\partial y} - i\hbar x/2. \end{aligned} \quad (3)$$

注意到

$$\mathbf{U}(g) = e^{i\hbar(z+xy/2)} e^{iy\mathbf{q}} e^{ix\mathbf{p}} = e^{i\hbar(z-xy/2)} e^{ix\mathbf{p}} e^{iy\mathbf{q}}, \quad (4)$$

易证有

$$\begin{aligned} D_{,x} \mathbf{U}(g) &= i\mathbf{U}(g)\mathbf{p}, \quad D_{,x} \mathbf{U}(g) = i\mathbf{p}\mathbf{U}(g), \\ D_{,y} \mathbf{U}(g) &= i\mathbf{U}(g)\mathbf{q}, \quad D_{,y} \mathbf{U}(g) = i\mathbf{q}\mathbf{U}(g). \end{aligned} \quad (5)$$

故对给定的密度矩阵 ρ , 系统任一力学量 $F(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ 的期望值可由其特征函数 $\varphi(g)$ 得出, 即有表达式:

$$\langle F(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rangle = \text{Tr}\{\rho \mathbf{F}\} = F(-iD_{,x}, -iD_{,y})e^{v(x,y)}|_{x=y=0}. \quad (6)$$

换句话说, 在量子统计力学中, 人们使用的密度矩阵表示完全可以用其特征函数 $\varphi(g)$ 来替代.

为了给出一般情形下量子系统的“可观测量代数”在群论形式中的表示, 我们注意到 $\varphi(g)$ 上的任一微分算符 D_g 均可以通过表示式:

$$D_g \varphi(g) = \int_{H(1)} f(g) \varphi(g) dg \quad (7)$$

用群上广义函数 $f(g)$ 来表示²⁾, 而两个算符的乘积可用其相应的广义函数的卷积来表示. 因此, 只要给定了能描述所研究量子力学系统动力学特征的“相群”, 我们就可构造出相应的量子力学的“群论形式”^[9].

考虑一个量子力学系统, 它的“相群” G 是一个具有双不变Haar测度的幺模李群. 用 $\mathcal{E}(G)$ 和 $\mathcal{E}'(G)$ 分别表示 G 上 C^∞ 函数和具有紧支集的广义函数的集合, 并定义群上广义函数的转置, 对合(相当于算符的共轭运算)和卷积如下:

$$\begin{aligned} f^T(g) &= f(g^{-1}), \quad f^\dagger(g) = \bar{f}(g^{-1}), \\ f \circ k(g) &= \int_G f(g h^{-1}) k(h) dh, \end{aligned} \quad (8)$$

其中, $f, k \in \mathcal{E}'(G)$. 可证此时 $\mathcal{E}'(G)$ 构成一个“对合代数”(也称作“*-代数”)^[12], 它就是该量子系统的“可观测量代数”. 下面来讨论这类对合代数在Hilbert空间 $\mathcal{H}$ 上的算符表示. 由于我们的“可观测量代数”是建立在群的基础上, 所以并不需要像 C^* 代数的表示理论那样借助于“GNS构造”, 而是可以直接采用群 G 在Hilbert空间 $\mathcal{H}$ 上的表示. 需要注意的是, 此时不同的表示对应的可以是不同的量子系统(例如, $SU(2)$ 群的不同表示给出不同的自旋系统).

设 $g \rightarrow \mathbf{U}(g)$ 是群 G 在Hilbert空间 $\mathcal{H}$ 上的一个不可约酉表示. 对任意的 $f, k \in \mathcal{E}'(G)$, 定义 $\mathcal{H}$ 上的算符

$$\mathbf{F} = \int_G f(g) \mathbf{U}(g) dg, \quad \mathbf{K} = \int_G k(g) \mathbf{U}(g) dg. \quad (9)$$

假定该李群的表示空间 $\mathcal{H}$ 中存在一稠子空间 $\mathcal{D}$, 使得所有算符 $\mathbf{F}$ 的定义域均包含 $\mathcal{D}$, 且 $\mathcal{D}$ 是一个不变子空间(见文献[11]), 则由于 dg 是群 G 上的双不变测度, 算符 $\mathbf{F}$ 和 $\mathbf{K}$ 的乘积为

$$\mathbf{F}\mathbf{K} = \int_G f \circ k(g) \mathbf{U}(g) dg. \quad (10)$$

即 G 的不可约酉表示被直接推广成对合代数 $\mathcal{E}'(G)$ 在Hilbert空间 $\mathcal{H}$ 上的算符表示. 这里我们可以清楚地看到, “相群” G 的非交换性如何决定了相应的“可观测量代数”的非交换性.

现在来讨论“量子态”的表示. G 上的任一 C^∞ 函数 $\varphi(g)$, 如果满足(1) $\varphi(e) = 1$ (e 表示 G 的单位元); (2) 对任意复数序列 α_j 和群元序列 $g_j \in G$ 有 $\sum_{j,k} \varphi(g_j g_k^{-1}) \alpha_j \bar{\alpha}_k \geq 0$, $\varphi(g)$ 便称作群 G 上的特征函数. 用 $\mathcal{S}(G)$ 表示 G 上的全体特征函数的集合, 则 $\mathcal{S}(G)$ 是 $\mathcal{E}(G)$ 中的一个凸子集. 通过群 G 在Hilbert空间 $\mathcal{H}$ 上的表示, 可以得到特征函数 $\varphi(g) \in \mathcal{S}(G)$ 的算符表示

$$\rho = \int_G \varphi(g) \mathbf{U}^\dagger(g) dg. \quad (11)$$

易证 ρ 是 $\mathcal{H}$ 上的一个密度矩阵, 应用式(9)中的力学量 $\mathbf{F}$ 的表示式, 可得其期望值为

$$\text{Tr}\{\rho \mathbf{F}\} = \int_G f(g) \varphi(g) dg. \quad (12)$$

此外, 由群上特征函数的定义(2)推得 $\int_G f \circ f^\dagger(g) \varphi(g) dg \geq 0$, 即 $\varphi(g)$ 是对合代数 $\mathcal{E}'(G)$ 上的一个正线性泛函.

对于给定的群表示 $g \rightarrow \mathbf{U}(g)$, 式(9)–(12)给出了“群上函数”表示与通常的“Hilbert空间算符”表示间的转换关系.

2) 例如 $\frac{\partial}{\partial x} \varphi(g) = - \int_{H(1)} \delta'_x(g) \varphi(g) dg$, 这里 $\delta'_x(g) = (2\pi/\hbar)^2 \frac{\partial \delta(x)}{\partial x} \delta(y) \delta(z)$ 是群上的广义函数.

4 量子特征函数在量子统计力学中的应用

前面的讨论清楚表明, 我们在上一节中给出的“量子力学的群论形式”, 是以 von Neumann 的量子力学形式体系为基础的“量子概率论”中的一个特殊统计模型, 前者适用于物理学家关注的“量子力学系统”的统计描述, 后者则适用于描述所有出现“非交换随机变量”的统计模型. 确切地说, “量子力学的群论形式”要求量子系统的可观测量代数必须是由某个“相群”生成的对合代数, 这相当于在 von Neumann 的量子力学数学框架中添加了一个新的要求. 尽管这个要求从“量子概率论”的角度看并非必要, 但从本文作者看来, 为了更有效地描述量子系统的动力学规律, 这一要求却是不可或缺的. 需要强调的是, 正是由于“量子力学的群论形式”反映了量子系统的动力学特征, 采用这一新的数学形式处理量子统计力学的具体问题时, 往往要比采用传统的 von Neumann 的量子力学形式体系更为有效和简便. 下面我们就来讨论几个具体例子.

4.1 复杂量子系统的约化

先谈复合量子系统的约化. 考虑一个由两个子系统组成的复合量子系统, 子系统 I 和 II 分别由 n 和 m 对正则变量描述. 其态矢量空间表示成 $\mathcal{H} = \mathcal{H}_I \otimes \mathcal{H}_{II}$, 其中 $\mathcal{H}_I$ 和 $\mathcal{H}_{II}$ 分别是子系统 I 和 II 的态矢量空间. 设 $\{|u_j\rangle, j = 1, 2, \dots\}$ 和 $\{|v_k\rangle, k = 1, 2, \dots\}$ 分别是 $\mathcal{H}_I$ 和 $\mathcal{H}_{II}$ 中的正交归一基, 则该复合量子系统的密度矩阵 ρ 可表示成

$$\rho = \sum_{jk, j'k'} a_{jk, j'k'} |u_j\rangle |v_k\rangle \langle v_{k'}| \langle u_{j'}|. \quad (13)$$

如果我们只对子系统 I 的动力学行为感兴趣, 便需采用密度矩阵 ρ 在 Hilbert 空间 $\mathcal{H}_I$ 中的约化表示

$$\rho_I = \sum_{j, j'} b_{jj'} |u_j\rangle \langle u_{j'}|; \quad b_{jj'} = \sum_k a_{jk, j'k}. \quad (14)$$

现改用“量子特征函数”对这个量子系统进行相同的约化表示. 复合系统的相群为 Heisenberg-Weyl 群 $H(n+m)$, 而它的两个子系统的相群分别为 $H(n)$ 和 $H(m)$. 令 $g \rightarrow e^{i\hbar} \mathbf{U}_n(g)$ 是

群 $H(n)$ 在 Hilbert 空间 $\mathcal{H}_I$ 上的一个不可约酉表示, 这里 $\mathbf{U}_n(g) = e^{i \sum_{j=1}^n (x_j \mathbf{P}_j + y_j \mathbf{Q}_j)}$. 则对应于密度矩阵 ρ 的特征函数为

$$\varphi(g) = e^{i\hbar} \text{Tr}[\rho \mathbf{U}_{n+m}(g)]. \quad (15)$$

对应于约化密度矩阵 ρ_I 的特征函数为

$$\begin{aligned} \varphi_I(g_I) &= e^{i\hbar} \text{Tr}[\rho(\mathbf{U}_n(g_I) \otimes \mathbf{I}_{II})] \\ &= \varphi(g)|_{x_{n+1}=y_{n+1}=\dots=x_{n+m}=y_{n+m}=0}, \end{aligned} \quad (16)$$

其中 $g_I \in H(n)$, $\mathbf{I}_{II}$ 是 $\mathcal{H}_{II}$ 上的单位算符.

可以看到, 使用式(14)求约化密度矩阵 ρ_I 时须首先选择适当的基, 然后再进行求迹计算. 而使用式(16)计算 $\varphi_I(g_I)$ 时, 只需把 $\varphi(g)$ 限制在子群 $H(n)$ 上, 便能得出 $\varphi_I(g_I)$. 文献[8]中给出的经典统计力学中 BBGKY 方程系列在量子统计力学中的推广, 正是利用了量子特征函数的这一特性.

对于能用相群 G 描述的复杂量子系统, 如果我们只对它的某个力学量集合 $S = \{\mathbf{F}_1, \dots, \mathbf{F}_n\}$ 的动力学行为感兴趣, 就需要一个有效的对量子态的约化描述. 令 $\mathcal{A} \subseteq \mathcal{E}'(G)$ 是由集合 S 生成的对合代数, 通用的约化办法是给出子代数 $\mathcal{A}$ 在 G 表示空间 $\mathcal{H}$ 中的一个不可约子空间 $\mathcal{H}_{\mathcal{A}}$, 然后求密度矩阵 ρ 在该子空间上的约化表示. 但在许多实际问题中, 往往有 $\mathcal{A} \subseteq \mathcal{E}'(H)$, 这里 H 是 G 的一个子群. 此时, 量子态的约化就能通过将 $\varphi(g)$ 限制在子群 H 上实现. 这方面的一个简单例子就是关于量子系统质心运动的约化描述(见文献[8]).

4.2 量子开系统的不可逆动力学演化与密度矩阵在指针态基上的展开

一般的量子力学教科书中, 往往只讨论量子闭系统在给定外场中的运动. 这类运动用态矢量空间的酉变换描述, 其动力学变化是可逆的. 只有在讨论到波函数的概率解释时, 才会涉及不可逆的测量过程. von Neumann 最早给出了在量子力学框架内测量过程的数学描述, 即用密度矩阵表示量子系统, 而测量过程导致了波函数“演化”成由被观测量的本征态组成的“混合态”. 至于如何解释这一演化的含义, 它究竟是一种由测量仪器与系统间相互作用

引起的动力学演化, 还是观测者在认知上的变化, 以及如何从量子力学层面来解释现实世界所显示的经典特征, 则是多年来量子力学基础理论研究中一直争论不休的问题. 在过去的几十年里, 由于对量子系统“退相干”过程的研究, 物理学界逐渐取得了一种新的共识, 那就是任一量子系统由纯态“演化”成“混合态”的不可逆过程, 应该被看成是该系统与环境(整个外界)相互作用的结果^[13].

无可否认的事实是, 所有现实的系统都应被看成是一个开系统. 事实上, 在经典力学中人们为了简化对系统动力学行为的研究而忽略掉的那些被认为是无关紧要的外界影响, 在量子力学中却扮演了对量子“退相干”过程起决定性作用的角色. von Neumann提供的测量理论的误区在于把量子系统的不可逆演化限制在由测量仪器与系统间相互作用引起的动力学演化上, 并要求演化的结果必须是由特定观测量的本征态组成的“混合态”. 依照近年来关于量子“退相干”的理论研究, 一个量子开系统的不可逆演化过程, 不应简单地用“观测者的观测”来解释, 而应解释成无处无刻不在的“环境的监测”造成的结果. 演化的结果通常也不应该用某个可观测量的本征态组成的“混合态”来表示, 而是应该用被称作“指针态”组成的“混合态”来表示^[14]. 所谓的“指针态”, 指的是那些在环境导致的“退相干”作用下相对最稳定的纯态, 它们在开系统的态空间中组成一个“指针态基”(Pointer Basis). 与由可观测量的本征态组成的正交基不同, 在许多情况下这个“指针态基”可以是一个非正交的完全基. 这方面的例子之一是一个由任意纯态描述的“量子布朗粒子”, 在固定的热库中, 将迅速地演化成由某类特定Gauss波包组成的混合态, 从而在一定程度上显示了粒子的经典特性^[15].

在量子统计力学中, 人们把描述开系统动力学演化的方程称作“主方程”. 如果复合系统(系统+环境)的密度矩阵为 $\rho_{SE}(t)$, 则开系统的约化密度矩阵为

$$\rho_S(t) = \text{Tr}_E[\mathbf{U}(t)\rho_{SE}(0)\mathbf{U}^\dagger(t)], \quad (17)$$

其中, $\mathbf{U}(t) = e^{i\mathbf{H}_{SE}t}$, $\mathbf{H}_{SE}$ 是复合系统 SE 的哈密顿算符. 在一般情况下, 从方程(17)直接求约化密度矩

阵 $\rho_S(t)$ 是极为困难的. 通常人们将方程(17)改写成下面的主方程形式:

$$\frac{d}{dt}\rho_S(t) = \mathcal{L}[\rho_S(t)] \equiv -i[\mathbf{H}'_S, \rho_S(t)]/\hbar + \mathcal{D}[\rho_S(t)], \quad (18)$$

其中, $\mathbf{H}'_S$ 表示受环境微扰后系统的哈密顿量, 它给出系统的酉变换部分, $\mathcal{D}$ 是作用在 $\rho_S(t)$ 上的一个超算子, 它给出系统的不可逆演化部分(退相干和耗散). 由于系统的动力学演化与它和环境间的相互作用有关, 当环境演化有显著的记忆效应时, $\mathcal{D}$ 可以是 t 的函数, 也可与复合系统的历史轨迹有关, 从而使得方程(18)表现出非Markov型特征. 因此人们实际使用的主方程, 一般说来只是方程(18)的一种近似. Schlosshauer^[16]在他的《退相干与量子经典过渡》(*Decoherence and The Quantum-to-Classical Transition*)一书的第四章中, 给出了如何在Born近似和Markov近似下得出主方程的详细推导.

从上面的讨论可知, 为了在现有的量子力学框架内, 用退相干理论解释现实世界所显示的经典特征, 我们需要解决下面三个问题: (1) 给出一个能较好地描述量子开系统不可逆动力学演化的主方程; (2) 求出该主方程的稳态解(如果存在的话); (3) 将得到的稳态解分解成能显示稳定经典特性的“指针态”的凸组合(量子系综). 这三个问题中的第一个最为关键, 目前的情况是在处理个别具体问题上已经有了一些相当有效的主方程, 但尚未建立起能描述量子开系统的不可逆动力学演化的普适型主方程. 下面我们讨论的是一个已得到广泛应用的量子光学主方程^[17,18]. 我们将阐明, 如何用量子特征函数替代密度矩阵, 以便更有效地求解一个在热库中的阻尼谐振子的主方程, 并将其稳态解分解成Gauss波包的凸组合.

考虑一个处在温度为 $T = 1/k\beta$ 的热库中谐振子. 引入湮灭和产生算符

$$a = \frac{m\omega q + ip}{\sqrt{2\hbar m\omega}}, \quad a^\dagger = \frac{m\omega q - ip}{\sqrt{2\hbar m\omega}}. \quad (19)$$

假定热库由一组独立的谐振子组成, 则在旋转波近似下系统加环境的哈密顿算符为

$$H_{SE} = \mathbf{H}_S + H_E + V$$

$$= \hbar\omega a^\dagger a + \sum_j \hbar\omega_j b_j b_j^\dagger + \sum_j \hbar(\kappa_j b_j a^\dagger + \bar{\kappa}_j b_j^\dagger a), \quad (20)$$

其中, H_S 和 H_E 分别是谐振子与环境的哈密顿算符, V 是他们间的相互作用. 用 ρ 表示谐振子的约化密度矩阵, 则在 Markov 近似下有主方程^[17]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} = & i\bar{\omega}[\rho, a^\dagger a] + \gamma(N_\beta + 1)\left(a\rho a^\dagger - \frac{1}{2}\{a^\dagger a, \rho\}\right) \\ & + \gamma N_\beta\left(a^\dagger \rho a - \frac{1}{2}\{aa^\dagger, \rho\}\right), \end{aligned} \quad (21)$$

其中, γ 是阻尼系数, $N_\beta = 1/(e^{\hbar\beta\omega} - 1)$, 而 $\bar{\omega} = \omega + \Delta\omega$ 表示重正化后的谐振子频率.

为了得出方程(21)的显式解, 引入复变量 $\xi = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}x + i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}y$, 使 $\xi a - \bar{\xi} a^\dagger = i(xp + yq)$. 于是从式(2)可得对应于密度矩阵 ρ 的特征函数:

$$\varphi(g) = \text{Tr}[\rho \mathbf{U}(g)] = e^{iz\hbar} \text{Tr}[\rho e^{\xi a - \bar{\xi} a^\dagger}] = e^{iz\hbar + v(\xi)}. \quad (22)$$

应用恒等式 $a\mathbf{U}(g) = (\partial/\partial\xi - \bar{\xi}/2)\mathbf{U}(g)$, $\mathbf{U}(g)a = (\partial/\partial\xi + \bar{\xi}/2)\mathbf{U}(g)$ 把方程(21)改写成

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = & \left\{ i\bar{\omega} \left(\bar{\xi} \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} - \xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) - \frac{\gamma}{2} \left((2N_\beta + 1)|\xi|^2 + \left(\bar{\xi} \frac{\partial}{\partial \bar{\xi}} + \xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \right) \right\} \varphi, \end{aligned} \quad (23)$$

或

$$\begin{aligned} \frac{\partial v(\xi, t)}{\partial t} + \left(\frac{\gamma}{2} + i\bar{\omega} \right) \xi \frac{\partial v}{\partial \xi} + \left(\frac{\gamma}{2} - i\bar{\omega} \right) \bar{\xi} \frac{\partial v}{\partial \bar{\xi}} \\ + \frac{\gamma}{2} (2N_\beta + 1) |\xi|^2 = 0. \end{aligned} \quad (24)$$

若初始态为一 Gauss 波包, 且有 $\langle q \rangle = \bar{q}$, $\langle p \rangle = \bar{p}$, $\langle (q - \bar{q})^2 \rangle = \sigma^2$, 则有

$$\begin{aligned} v(\xi, 0) = & \alpha\xi - \bar{\alpha}\bar{\xi} - \frac{1}{2} \left(\frac{(\xi + \bar{\xi})^2}{16\lambda} - \lambda(\xi - \bar{\xi})^2 \right) \\ = & i(x\bar{p} + y\bar{q}) - \left(\frac{\hbar^2 x^2}{8\sigma^2} + \frac{\sigma^2 y^2}{2} \right), \end{aligned} \quad (25)$$

其中, $\alpha = (m\omega\bar{q} + i\bar{p})/\sqrt{2\hbar m\omega}$, $\lambda = m\omega\sigma^2/2\hbar$. 容易验证, 当给定初条件式(25)时, 方程(24)的解为

$$v(\xi, t) = e^{-\gamma t} \left[\left(N_\beta + \frac{1}{2} \right) |\xi|^2 - \frac{1}{32\lambda} (\xi e^{-i\bar{\omega}t} + \bar{\xi} e^{i\bar{\omega}t})^2 \right.$$

$$\left. + \frac{\lambda}{2} (\xi e^{-i\bar{\omega}t} - \bar{\xi} e^{i\bar{\omega}t})^2 \right] + e^{-\frac{\gamma t}{2}} (\alpha \xi e^{-i\bar{\omega}t} - \bar{\alpha} \bar{\xi} e^{i\bar{\omega}t}) - \left(N_\beta + \frac{1}{2} \right) |\xi|^2. \quad (26)$$

在上式中令 $t \rightarrow \infty$, 便得到稳态解

$$\begin{aligned} v_{ss} = & - \left(N_\beta + \frac{1}{2} \right) |\xi|^2 \\ = & - \frac{\hbar}{2} \left(N_\beta + \frac{1}{2} \right) \left(m\omega x^2 + \frac{y^2}{m\omega} \right). \end{aligned} \quad (27)$$

由稳态解 v_{ss} 可推得相应的密度矩阵为 $\rho_{ss} = \frac{1}{N_\beta} e^{-\beta H_S}$, 即系统的稳定态与正则系综分布的预言一致.

下面讨论如何将该稳定态分解成一个具有固定波宽 σ 的 Gauss 波包组成的混合态. Gauss 波包的特征函数 $\varphi_{\sigma, \bar{q}, \bar{p}}(g)$ 已由式(25)给出, 假定

$$\varphi_{ss}(g) = \int d\bar{q} \int d\bar{p} \varrho_\sigma(\bar{q}, \bar{p}) \varphi_{\sigma, \bar{q}, \bar{p}}(g), \quad (28)$$

则

$$\varrho_\sigma(\bar{q}, \bar{p}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dx \int dy e^{-i(x\bar{p} + y\bar{q}) + v_{ss}(x, y) + \frac{\hbar^2}{8\sigma^2} x^2 + \frac{\sigma^2}{2} y^2}. \quad (29)$$

因系综分布密度 $\varrho_\sigma(\bar{q}, \bar{p}) \geq 0$, 在上式中将 v_{ss} 的式(27)代入后得 $\varphi_{ss}(g)$ 存在 Gauss 波包分解的条件为

$$\frac{1}{4(N_\beta + \frac{1}{2})} \leq 2\lambda = \frac{m\omega\sigma^2}{\hbar} \leq N_\beta + \frac{1}{2}. \quad (30)$$

该结果表明, 当环境温度不等于零时, 由主方程(21)给出的稳定态将具有多种 Gauss 波包分解. 为了确定何种分解是所谓的“指针态”分解, 我们需要计算不同宽度的波包在给定的温度下熵产生的初始速率(它表征了纯态在给定环境下的稳定性)^[19]. 我们采用的熵的表示式为

$$\begin{aligned} S(t) = & -\ln \text{Tr}[\rho^2(t)] \\ = & -\ln \left[\frac{\hbar}{2\pi} \int dx \int dy e^{v(\xi, t) + \bar{v}(\bar{\xi}, t)} \right]. \end{aligned} \quad (31)$$

由解式(26)容易算得

$$\frac{dS}{dt} \Big|_{t=0} = \frac{\gamma}{8\lambda} [(1 - 4\lambda)^2 + 2N_\beta(1 + 16\lambda^2)], \quad (32)$$

即当 $\lambda = 1/4$ 时熵产生的初始速率达极小值. 注意到 $\sigma^2 = \hbar/2m\omega$ 时的 Gauss 波包即为谐振子的相干态,

我们得出结论: 由主方程(21)给出的“指针态基”就是相干态. 需要特别指出的是, 相干态是湮灭算符 a 的本征态, 它们给出Hilbert空间 $\mathcal{H}$ 中的一组非正交的完全基^[20]. 但由于 a 是非厄米算符, 它并非一个可观测量. 尽管如此, 我们注意到式(20)中给出的系统与环境的互作用哈密顿量 V 是 a 与 $a^\dagger$ 的线性组合. 因此, 在这个例子中, 开系统的“指针态基”主要由系统与环境的相互作用决定这一论点无疑仍然正确^[21]. 另外需要指出, 我们这里采用的主方程(21)与文献[19]中采用的描述谐振子量子布朗运动的Caldeira-Leggett (CL)主方程是有差别的. 该文之所以得出了“指针态基”是相干态的结果, 是因为文中并未给出CL主方程的显式解, 而开系统熵产生的计算只是一个近似估算. 在最近一篇文章^[22]中, 作者从CL主方程的显式解出发, 讨论了由这类主方程确定的“指针态基”的性质, 给出了与文献[19]中不同的结果(见后).

最后还应说明一下, 早在20世纪70年代, Louisell^[17]就已经在他的书的第六章中对方程(21)的解予以详细讨论, 其后该方程也被Englert等人^[23]以不同形式求得其显式解. 但他们的工作都采用了传统的“密度矩阵”表示形式. 容易确认, 试图在这一形式下直接推导出主方程的稳定态并证实“指针态基”就是相干态, 无疑是一桩极其复杂的工作.

4.3 量子布朗运动主方程

在近年来的物理期刊上, 关于量子布朗运动的理论研究发表了大量工作(见文献[22]中所引文献), 这里要讨论的问题仅限于如何将CL主方程(及其Lindblad型推广)的稳态解分解成具有给定宽度的Gauss波包组成的系综. 这是因为这个问题的解决, 对阐明为什么我们所处的这个世界在微观层面遵循量子力学规律而宏观上却表现出经典特征(即所谓的“量子经典过渡”)具有重要意义. 我们可以看到, 在处理这类问题时, 采用“特征函数”表示明显要比采用传统的“密度矩阵”表示有效得多.

CL主方程的研究对象, 仍然是一个处在热库中的谐振子, 只是采用的谐振子与热库间的相互作用哈

密顿量的形式与前面的例子略有不同. 设系统加环境的哈密顿算符为 $H_{SE} = H_S + H_E + V$, 其中

$$\begin{aligned} H_S &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{q}^2, \\ H_E &= \sum_j \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2}m_j\omega_j^2 q_j^2, \\ V &= \mathbf{q} \sum_j c_j q_j. \end{aligned} \quad (33)$$

采用Born近似和Markov近似, 且假定热库中谐振子的谱密度为Lorentz-Drude型, 则系统的约化密度矩阵 ρ 的主方程为^[16,24]

$$\frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[H_S, \rho] - \frac{i\gamma}{\hbar}[\mathbf{q}, \{\mathbf{p}, \rho\}] - \frac{2\gamma m}{\beta\hbar^2}[\mathbf{q}, [\mathbf{q}, \rho]]. \quad (34)$$

开系统的相群是Heisenberg-Weyl群 $H(1)$, 应用式(2)及恒等式

$$[\mathbf{q}, \mathbf{U}] = -\hbar x \mathbf{U}, [\mathbf{p}, \mathbf{U}] = \hbar y \mathbf{U}, \{\mathbf{p}, \mathbf{U}\} = -2i \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{U}, \quad (35)$$

可把方程(34)改写成

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \left(2\gamma x - \frac{y}{m} \right) \frac{\partial}{\partial x} + m\omega^2 x \frac{\partial}{\partial y} \right] v(x, y, t) + \frac{2m\gamma}{\beta} x^2 = 0. \quad (36)$$

对任意给定的系统初态 $v(x, y, 0)$, 采用“特征曲线法”容易求得方程(36)的显式解 $v(x, y, t)$ ^[22]. 令 $t \rightarrow \infty$, 则推得存在不依赖于初态的稳态解:

$$v_{ss}(x, y) = -\frac{m}{2\beta} \left(x^2 + \frac{y^2}{m^2\omega^2} \right). \quad (37)$$

将式(37)与主方程(21)的稳态解(27)相比较, 我们发现当 $\beta\hbar\omega \ll 1$ 时有 $N_\beta + 1/2 \approx 1/\beta\hbar\omega$, 即仅在高温区内CL主方程给出的稳态解才与正则系综分布的预言一致. 稳态解(37)的另一个问题是当 $\beta\hbar\omega > 2$ 时, 相应的密度矩阵 ρ_{ss} 不满足正性条件. 事实上Heisenberg不确定关系要求对任意的量子态必须满足不等式 $\langle \Delta \mathbf{p}^2 \rangle \langle \Delta \mathbf{q}^2 \rangle \geq 1\hbar^2/4$. 从式(37)可算得 $\langle \Delta \mathbf{p}^2 \rangle_{ss} \langle \Delta \mathbf{q}^2 \rangle_{ss} = 1/\beta^2\omega^2$, 即当 $\beta\hbar\omega > 2$ 时该稳态解不满足不确定关系.

现在来讨论稳态解(37)在何种条件下能表示成具有给定宽度的Gauss波包的凸组合. 将表示

式(37)代入式(29), 得

$$\begin{aligned} \varrho_{\sigma}(\bar{q}, \bar{p}) \\ = \frac{1}{(2\pi)^2} \int dx \int dy e^{-i(x\bar{p}+y\bar{q})+\left(\frac{\hbar^2}{8\sigma^2}-\frac{m}{2\beta}\right)x^2+\left(\frac{\sigma^2}{2}-\frac{1}{2m\beta\omega^2}\right)y^2}. \end{aligned} \quad (38)$$

故稳态解(37)存在Gauss波包分解的条件为 $\beta\hbar\omega \leq 2$ 及 $\sigma \in [\sigma_-, \sigma_+]$, 这里 $\sigma_- = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\beta}{2m}}$, $\sigma_+ = \frac{1}{\omega \sqrt{m\beta}}$. 此外, 从已知的显式解 $v(x, y, t)$ 及式(31)可算得初始波包宽为 σ 时熵的演化, 有

$$S(t) = 2\delta\gamma t - 4\delta(1+\delta)\gamma^2 t^2 + O(t^3), \delta = \frac{4m\sigma^2}{\hbar^2\beta} - 1. \quad (39)$$

因此我们的结论是: (1) CL主方程仅当 $\beta\hbar\omega \leq 2$ 时才有具有物理意义的稳态解; (2) 当初态的Gauss波包宽度 $\sigma = \sigma_-$ 时熵产生的初始速率达极小值(换句话说, CL主方程给出的“指针态基”是波包宽度为 $\frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{\beta}{2m}}$ 的Gauss波包, 它们只在 $\beta\hbar\omega = 2$ 时才是谐振子的相干态); (3) 只要初态的波包宽度 $\sigma < \sigma_-$, 约化密度矩阵 $\rho(t)$ 的正性在演化初期必然遭到破坏.

为了确保主方程(34)不破坏约化密度矩阵 $\rho(t)$ 的恒正性, 目前人们普遍使用的办法是要求主方程具有如下的Lindblad形式:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\rho(t) = \mathcal{L}[\rho(t)] = -i[\mathbf{H}_S, \rho(t)]/\hbar \\ + \sum_j \gamma_j(t) \left[2V_j(t)\rho(t)V_j^\dagger(t) - \{V_j^\dagger(t)V_j(t), \rho(t)\} \right], \end{aligned} \quad (40)$$

其中, $\gamma_j(t) \geq 0$.

关于CL主方程的Lindblad型推广显然有多种方式^[25], 下面我们讨论Gao^[26]以唯象的方式提出的一个关于CL主方程的Lindblad型推广(简称CLG方程). CLG主方程的表式如下:

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\mathbf{H}_S + \mathbf{V}_I, \rho] - \frac{i\gamma}{\hbar}[\mathbf{q}, \{\mathbf{p}, \rho\}] - \mu^2[\mathbf{q}, [\mathbf{q}, \rho]] \\ - \nu^2[\mathbf{p}, [\mathbf{p}, \rho]], \end{aligned} \quad (41)$$

其中, $\mathbf{V}_I = \mu\nu\hbar\{\mathbf{q}, \mathbf{p}\}$, $\mu^2 = m\gamma\omega \coth(\hbar\omega\beta/4)/2\hbar$, $\nu^2 = \gamma \tanh(\hbar\omega\beta/4)/2\hbar m\omega$. 采用“特征函数”表示后, 方程(41)写成

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \left(2\gamma x - \frac{y}{m} \right) \frac{\partial}{\partial x} + m\omega^2 x \frac{\partial}{\partial y} \right] v(x, y, t)$$

$$+ \hbar^2(\mu^2 x^2 + \nu^2 y^2) = 0. \quad (42)$$

可以看到, 在高温情形下, 方程(42)是方程(36)的一个很好的近似.

从方程(42)可得其稳态解为

$$v_{ss}(x, y) = -(a^2 x^2 + 2cxy + b^2 y^2), \quad (43)$$

其中,

$$\begin{aligned} a^2 &= \frac{\hbar^2(\mu^2 + m^2\omega^2\nu^2)}{4\gamma}, \\ b^2 &= \frac{\hbar^2[\mu^2 + (4\gamma^2 + \omega^2)m^2\nu^2]}{4\gamma m^2\omega^2}, \\ c &= -\frac{\hbar^2 m\nu^2}{2}. \end{aligned}$$

另外, 由 $\langle \mathbf{p}^2 \rangle_{ss} = 2a^2$, $\langle \mathbf{q}^2 \rangle_{ss} = 2b^2$, 我们得到平衡态时系统的平均能量值:

$$\langle \mathbf{H}_S \rangle_{ss} = \frac{\hbar\omega}{4} \left[\coth\left(\frac{\hbar\omega\beta}{4}\right) + \left(1 + \frac{2\gamma^2}{\omega^2}\right) \tanh\left(\frac{\hbar\omega\beta}{4}\right) \right]. \quad (44)$$

在高温时有 $\langle \mathbf{H}_S \rangle_{ss} \approx k_B T$, 在低温时有 $\langle \mathbf{H}_S \rangle_{ss} \approx \hbar\omega(1 + \gamma^2/\omega^2)/2$. 需要注意的是, CLG主方程的稳态解不仅与温度有关, 还依赖于环境的阻尼系数 γ . 这一不寻常的结果意味着, 为了准确地描述低温下量子开系统的性质, 人们有必要超越统计力学中使用正则系综描述平衡态的传统, 建立更为普适的统计平衡系综的描述法则.

有了CLG主方程的稳态解, 应用式(29), 我们可将其表示成具有给定宽度的Gauss波包的凸组合, 然后通过计算熵的演化, 确定何种纯态可被称作“指针态”. 我们得到的结果是(见文献[22]): 稳态解(43)存在Gauss波包分解的条件为 $\sigma \in [\sigma_-, \sigma_+]$, 这里

$$\begin{aligned} \sigma_{\pm}^2 &= \frac{1}{a^2} \left\{ a^2 b^2 - c^2 + \frac{\hbar^2}{16} \right. \\ &\quad \left. \pm \sqrt{\left[\left(ab - \frac{\hbar}{4} \right)^2 - c^2 \right] \left[\left(ab + \frac{\hbar}{4} \right)^2 - c^2 \right]} \right\}. \end{aligned} \quad (45)$$

而宽度为 σ 的Gauss波包的熵产生初始速率为

$$\left. \frac{dS(t)}{dt} \right|_{t=0} = \frac{\gamma m \sigma^2 \omega}{2 \hbar \tanh\left(\frac{\hbar \beta \omega}{4}\right)} \left[\frac{\hbar \tanh\left(\frac{\hbar \beta \omega}{4}\right)}{m \sigma^2 \omega} - 2 \right]^2. \quad (46)$$

式(46)表明, 当位置方差 $\sigma_0^2 = \hbar \tanh(\hbar \beta \omega / 4) / 2 m \omega$ 时, 熵产生的初始速率达极小. 然而可以证明不等式 $\sigma_0^2 < \sigma_-^2$ 恒成立, 即最稳定的那个Gauss波包并不是稳态解(43)给出的混合态中的一个成员. 另外, 我们还注意到, 当 $c^2 > (ab - \hbar/4)^2$ 时式(45)右端出现复数, 此时CLG主方程的稳态解将不存在Gauss波包分解.

从上面三个主方程的讨论得知如下几方面.

(1) 除了量子光学主方程外, CL及CLG主方程的稳态解均不能用正则分布表示. (2) 一个量子开系统, 若其主方程存在稳态解, 且稳态解的特征函数是Heisenberg-Weyl 群上的Gauss型函数, 则可用式(28)和(29)将其分解成一个具有固定波宽 σ 的Gauss波包组成的混合态. 但存在此种分解是有条件的, 即波宽 σ 须满足不等式 $\sigma \in [\sigma_-, \sigma_+]$. (3) 为了确定哪一种波包在环境的影响下相对最稳定, 我们采用了文献[19]中提出的判别标准(熵产生初始速率的大小), 并以此来确定该量子开系统的“指针态基”. 我们得到的结果是: 1) 量子光学主方程的“指针态基”是相干态; 2) CL主方程的“指针态基”是波宽 $\sigma = \sigma_-$ 的Gauss波包, 它们只在 $\beta \hbar \omega = 2$ 时才是谐振子的相干态; 3) 对于CLG主方程, 我们发现并非在所有情况下它的稳态解都存在Gauss波包分解, 但波宽 $\sigma = \sigma_-$ 的Gauss波包依然相对最为稳定. (4) 一个量子开系统的“指针态基”原则上是由其主方程确定的, 它无疑与系统与环境的相互作用哈密顿量 V 的组成有关, 但不一定是与 V 对应的系统的某个可观测量的本征态. 在我们讨论的三个例子中, 量子光学主方程的“指针态”虽然是湮灭算符 a 的本征态, 但 a 是一个“非厄米算符”. 至于CL和CLG主方程的“指针态基”, 都只能看成是位置算符 q 的近似本征态. 因此, 究竟什么样的纯态才能定义成一个量子

开系统的“指针态”尚是一个有待进一步研究讨论的问题.

5 结论

本文注意到, “统计规律”与“动力学规律”是自然界中两类不同性质的自然规律. 我们先以经典统计力学为例, 阐明Gibbs创建的系综理论之所以成为近代统计力学的理论基础, 是因为他在哈密顿力学的基础上引入了“相空间”的概念, 并借助于相空间上的“不变测度”, 以最完美的方式完成了“统计规律”与“动力学规律”间的统一描述. 接下来我们讨论了“量子统计力学”与“量子概率论”间的关系. 在此基础上我们指出, 目前人们在“量子统计力学”中普遍使用的由von Neumann创建的Hilbert空间与密度矩阵的描述方式, 由于未能具体地反映物理学家感兴趣的物理系统的“动力学特征”, 因而需要在该数学框架中添加一个新的数学结构——“相群”. 研究表明, 一旦在von Neumann 的数学框架中引入了反映物理系统“动力学特征”的“相群”, 就能很自然地吧“经典概率论”中广泛使用的“特征函数”推广到“量子概率论”中去, 从而建立起一个以“相群”为基础的“量子力学的群论形式”. 在该数学框架下, 量子态用“群上特征函数”表示, 力学量用“群上具有有界支集的广义函数”表示. 在第3章中, 我们给出了这种“群上函数”表示与通常的“Hilbert空间算符”表示间的转换关系. 最后, 我们还讨论了在量子统计力学的理论研究中, 采用“量子特征函数”这一新的数学表示时所显示的优越之处. 特别是, 用“群上特征函数”表示给出了“量子光学主方程”的显式解, 求出该方程的稳态解, 证实了此时的“指针态基”就是相干态. 此外, 我们还在“特征函数”表示下, 讨论了量子布朗运动的Caldeira-Legget主方程及其Lindblad型的推广, 给出了求量子开系统在给定环境下的“指针态基”的步骤, 以及如何将“密度矩阵”在“指针态基”上展开的方法.

致谢 感谢厦门大学王矫教授以及中国科学技术大学王文阁教授和颜华博士的有益讨论.

参考文献

- 1 Jancel R. Foundations of Classical and Quantum Statistical Mechanics. London: Pergamon Press, 1959
- 2 Kolmogorov A N. Foundations of Probability Theory. New York: Chelsea, 1956; Ito K, ed. Liu Y W, translated. Probability Theory (in Chinese). Beijing: Science Press, 1963 [伊藤清, 著. 刘璋温, 译. 概率论. 北京: 科学出版社, 1963]
- 3 Born M. The statistical interpretation of quantum mechanics. In: Foundation N, ed. Nobel Lectures: Physics 1942–1962. Amsterdam: Elsevier, 1964. 256–267
- 4 von Neumann J. Mathematical Foundations of Quantum Mechanics. New York: Princeton University Press, 1950
- 5 Meyer P A. Quantum Probability for Probabilists. Berlin: Springer, 1995
- 6 Holevo A S. Statistical Structure of Quantum Theory. Berlin: Springer, 2001; Diosi L. A Short Course in Quantum Information Theory. Berlin: Springer, 2011, and references therein
- 7 Pedersen G K. C^* -Algebras and Their Automorphism Groups. New York: Academic Press, 1979
- 8 Gu Y. Group-theoretical formalism of quantum mechanics based on quantum generalization of characteristic functions. [Phys Rev A](#), 1985, 32: 1310–1321
- 9 Gu Y. Group-theoretical formalism of quantum mechanics and classical-quantum correspondence. *Sci China Ser A*, 1992, 35: 200–210 [顾雁. 量子力学的群论形式与经典量子对应. 中国科学A, 1991, 8: 831–838]; Korbicz J K, Lewenstein M. Remark on a group-theoretical formalism for quantum mechanics and the quantum-to-classical transition. [Found Phys](#), 2007, 37: 879–896
- 10 Wolf K B. The Heisenberg-Weyl ring in quantum mechanics. In: Loeb E M, ed. Group Theory and Its Applications, Volume III. New York: Academic Press, 1975. 189–247
- 11 Barut A O, Raczk R. Theory of Group Representations and Applications. Warszawa: Polish Scientific Publishers, 1980. 249, 318
- 12 Helgason S. Groups and Geometric Analysis. London: Academic Press, 1984. 289
- 13 Schlosshauer M. Decoherence, the measurement problem, and interpretations of quantum mechanics. [Rev Mod Phys](#), 2005, 76: 1267–1305
- 14 Zurek W H. Decoherence, einselection, and the quantum origins of the classical. [Rev Mod Phys](#), 2003, 75: 715–775
- 15 Eisert J. Exact decoherence to pointer states in free open quantum systems is universal. [Phys Rev Lett](#), 2004, 92: 210401
- 16 Schlosshauer M. Decoherence and the Quantum-to-Classical Transition. Berlin: Springer, 2007
- 17 Louisell W H. Quantum Statistical Properties of Radiation. New York: John Wiley & Sons, 1973. 347
- 18 Englert B G, Morigi G. Five Lectures on Dissipative Master Equations, LNP 611. Berlin: Springer, 2002. 55–106
- 19 Zurek W H, Habib S, Paz J P. Coherent states via decoherence. [Phys Rev Lett](#), 1993, 70: 1187–1190
- 20 Glauber R J. Coherent and incoherent states of the radiation field. [Phys Rev](#), 1963, 131: 2766–2788
- 21 Zurek W H. Pointer basis of quantum apparatus: Into what mixture does the wave packet collapse? [Phys Rev D](#), 1981, 24: 1516–1525
- 22 Gu Y. Steady states of quantum Brownian motion and decomposition of quantum states into ensembles of Gaussian packets having a uniform position variance. [Phys Scr](#), 2019, 94: 115205
- 23 Englert B G, Naraschewski M, Schenzle A. Quantum-optical master equations: An interaction picture. [Phys Rev A](#), 1994, 50: 2667–2679
- 24 Caldeira A O, Leggett A J. Path integral approach to quantum Brownian motion. [Phys A](#), 1983, 121: 587–616
- 25 Gallis M R. Models for local Ohmic quantum dissipation. [Phys Rev A](#), 1993, 48: 1028–1034
- 26 Gao S. Dissipative quantum dynamics with a lindblad functional. [Phys Rev Lett](#), 1997, 79: 3101–3104

Quantum statistical mechanics, quantum probability and quantum characteristic function

GU Yan^{*}

Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China

The theory of quantum statistical mechanics is reviewed in the light of the quantum probability theory developed in recent years by mathematicians. We show that—which is our main motivation here—the former is a special model in the framework of the latter, by extending the characteristic function in the classical probability theory to the quantum probability theory based on the requirements of quantum statistical mechanics. We find that due to the fact that fundamental dynamical variables of a quantum system must respect certain commutation relations, one has to reform the classical characteristic function defined on a Euclidean space to a normalized, nonnegative definite function defined on a group which is generated by a Lie algebra formed from these commutation relations. Our key finding is that the group-theoretical characteristic function could be adopted to replace the density matrix commonly used in quantum statistical mechanics for representing a state of the quantum ensemble, and more than that, the new representation has some significant advantages in applications. To show its advantages compared with the conventional density matrix scenario, we illustrate its applications in: solving the master equation that describes the irreversible evolution of a quantum open system; determining the pointer states of a quantum open system; and expanding the density matrix with the pointer states. In particular, thanks to the quantum characteristic function, we are able to write down the solutions of the quantum-optical master equation explicitly, obtain its steady solutions and verify that the pointer states are exactly coherent states. Besides, the Caldeira-Leggett master equation for the quantum Brownian motion and its extension to the Lindblad type are also studied.

group-theoretical formalism of quantum statistical mechanics, quantum characteristic function, master equations of open quantum systems

PACS: 03.65.Yz, 03.65.Ud, 03.67.Mn

doi: [10.1360/SSPMA-2019-0365](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2019-0365)