《高等量子力学》第 5 讲

2. Schroedinger 绘景与 Heisenberg 绘景

描述时间演化的两种方式。

1）么正变换的两种形式

前面讨论的空间平移变换 $\hat{U}(d\vec{x})$ 和时间平移变换 $\hat{U}(dt)$ 都是对态的作用，

$$|\alpha\rangle \to \hat{U}(d\vec{x})\ |\alpha\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot d\vec{x}\right)|\alpha\rangle,$$

$$|\alpha\rangle \to \hat{U}(dt)\ |\alpha\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}dt\right)|\alpha\rangle,$$

而力学量保持不变。

与观测量相关的力学量矩阵元的变化

$$\langle\beta|\hat{A}|\alpha\rangle \to \left(\langle\beta|\hat{U}^+\right)\hat{A}\left(\hat{U}|\alpha\rangle\right) = \langle\beta|\left(\hat{U}^+\hat{A}\hat{U}\right)|\alpha\rangle$$

既可以看成

$$|\alpha\rangle \to \hat{U}|\alpha\rangle, \quad \text{力学量 } \hat{A} \text{ 保持不变，}$$

也可以看成

$$\hat{A} \to \hat{U}^+\hat{A}U, \quad \text{态 } |\alpha\rangle \text{ 保持不变。}$$

两种形式完全等价，不影响力学量的矩阵元的时间变化，特别是不影响力学量的平均值。例如，空间平移的作用既可以定义为

$$|\vec{x}\rangle \to U|\vec{x}\rangle = |\vec{x} + d\vec{x}\rangle, \qquad x \text{ 不变}$$

也可以表示为

$$\hat{\vec{x}} \to \hat{U}^+\hat{\vec{x}}\hat{U} = \left(1 + \frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot d\vec{x}\right)\hat{\vec{x}}\left(1 - \frac{i}{\hbar}\hat{\vec{p}}\cdot d\vec{x}\right) = \hat{\vec{x}} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{\vec{p}}\cdot d\vec{x},\ \hat{\vec{x}}\right] = \hat{\vec{x}} + d\vec{x},$$

$|\vec{x}\rangle$ 不变。

2）时间演化的 Schroedinger 绘景与 Heisenberg 绘景

Schroedinger 绘景：

态的时间演化 $|\alpha,t\rangle_S = \hat{U}(t)|\alpha,0\rangle_S$， $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

力学量保持不变 $\hat{A}_S$，

Heisenberg 绘景：

力学量的时间演化 $\hat{A}_H(t) = \hat{U}^+(t)\hat{A}_H(0)\hat{U}(t)$ ，

态保持不变 $|\alpha\rangle_H$ 。

考虑相同的初始条件，

$$\hat{A}_H(0) = \hat{A}_S,$$
$$|\alpha,0\rangle_S = |\alpha\rangle_H,$$

这也是两个绘景的联系。

性质：

（1）矢量内积（包括矩阵元，几率幅和平均值）与绘景无关：

$${}_S\langle\alpha,t|\beta,t\rangle_S = {}_S\langle\alpha,0|\hat{U}^+\hat{U}|\beta,0\rangle_S = {}_S\langle\alpha,0|\beta,0\rangle_S = {}_H\langle\alpha|\beta\rangle_H$$

（2）设在 *Schroedinger* 绘景有对易关系 $\left[\hat{A}_S, \hat{B}_S\right] = \hat{C}_S$，即在 *Heisenberg* 绘景有初始对易关系 $\left[\hat{A}_H(0), \hat{B}_H(0)\right] = \hat{C}_H(0)$。由于么正变换不改变对易关系，故在 *Heisenberg* 绘景有等时对易关系 $\left[\hat{A}_H(t), \hat{B}_H(t)\right] = \hat{C}_H(t)$。

（3）上面时间演化算符 $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ 中的哈密顿算符是在 *Schroedinger* 绘景引入的， $\hat{H} = \hat{H}_S$，但是

$$\hat{H}_H(t) = \hat{U}^+(t)\hat{H}_H(0)\hat{U}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{H}_S e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} = \hat{H}_S = \hat{H}\text{ 。}$$

上面只讨论了态和力学量的时间演化，基矢是否也象一般矢量一样随时间变化？

由于基矢是力学量的本征态，随时间的变化由力学量确定。

在 Schroedinger 绘景：力学量 $\hat{A}_S$ 不含时间，基矢 $|a\rangle_S$ 也不随时间变化。

在 Heisenberg 绘景，因为 $\hat{A}_H$ 依赖时间，故 $|a\rangle_H$ 必依赖于时间，

$$\hat{A}_H(t)|a,t\rangle_H = a|a,t\rangle_H,$$

$$\hat{U}^+(t)\hat{A}_H(0)\hat{U}(t)|a,t\rangle_H = a|a,t\rangle_H,$$

$$\hat{A}_H(0)\left(\hat{U}(t)|a,t\rangle_H\right) = a\left(\hat{U}(t)|a,t\rangle_H\right),$$

故本征态

$$|a,0\rangle_H = \hat{U}(t)|a,t\rangle_H, \qquad |a,t\rangle_H = \hat{U}^+(t)|a,0\rangle_H 。$$

总结：

	Schroedinger 绘景	Heisenberg 绘景
态	$\lvert\alpha,t\rangle_S = \hat{U}(t)\lvert\alpha,0\rangle_S$	$\lvert\alpha\rangle_H$ 与时间无关
力学量	$\hat{A}_S$ 与时间无关	$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^+(t)\hat{A}_H(0)\hat{U}(t)$
基矢	$\lvert a\rangle_S$ 与时间无关	$\lvert a,t\rangle_H = \hat{U}^+(t)\lvert a,0\rangle_H$

3）Heisenberg 绘景中的运动方程

由于经典力学中力学量随时间演化，因此量子力学的 Heisenberg 绘景更容易与经典力学比较。

对

$$\hat{A}_H(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}_H(0)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$$

求时间微分，得到 ***Heisenberg 绘景中的运动方程***，

$$\frac{d\hat{A}_H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}_H(t),\quad \hat{H}\right],$$

其地位类似于 ***Schroedinger 绘景中的运动方程***

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\ |\alpha,t\rangle_S=\hat{H}\ |\alpha,t\rangle_S\text{。}$$

比较分析力学中的运动方程

$$\frac{dA}{dt}=\left[A,H\right]_{poisson},$$

得到从经典力学到量子力学的方法，即正则量子化，

$$\text{经典力学}[\ ]_{poisson}\quad\rightarrow\quad\text{量子力学}\frac{1}{i\hbar}[\ ]\text{。}$$

4）*Ehrenfest* 定律

对于自由粒子，$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}$，有 *Heisenberg* 运动方程（忽略下标H）

$$\frac{d\hat{\vec{p}}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\vec{p}},\hat{H}\right]=0,\quad \hat{\vec{p}}(t)=\hat{\vec{p}}(0),$$

$$\frac{d\hat{\vec{x}}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\vec{x}},\hat{H}\right]=\frac{1}{2i\hbar m}\left[\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}}^2\right]=\frac{\hat{\vec{p}}(t)}{m}=\frac{\hat{\vec{p}}(0)}{m},\quad \hat{\vec{x}}(t)=\hat{\vec{x}}(0)+\frac{\hat{\vec{p}}(0)}{m}t,$$

对于一般体系，$\hat{H}=\frac{\hat{\vec{p}}^2}{2m}+V(\hat{\vec{x}})$，有 *Heisenberg* 运动方程

$$\frac{d\hat{\vec{p}}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\vec{p}},\hat{H}\right]=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\vec{p}},V(\hat{\vec{x}})\right]=-\nabla V(\hat{\vec{x}}),$$

这里已经将 $V(\hat{\vec{x}})$ 按 $\hat{\vec{x}}$ 的级数展开，并应用 $\left[\hat{x}_i,\hat{p}_j\right]=i\hbar\delta_{ij}$。

$$\frac{d\hat{\vec{x}}}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{\vec{x}},\hat{H}\right]=\frac{1}{2i\hbar m}\left[\hat{\vec{x}},\hat{\vec{p}}^2\right]=\frac{\hat{\vec{p}}}{m},$$

$$m\frac{d^2\hat{\vec{x}}}{dt^2}=\frac{d\hat{\vec{p}}}{dt}=-\nabla V(\hat{\vec{x}}),$$

两边求平均，$m\frac{d^2}{dt^2}\left\langle\hat{\vec{x}}\right\rangle=-\left\langle\nabla V(\hat{\vec{x}})\right\rangle,$

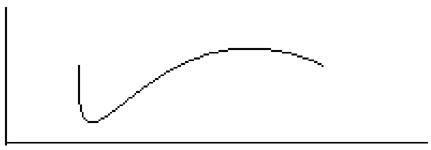
此即 **Ehrenfest 定律，对应经典力学中的牛顿定律。**由于平均值与绘景无关，关于平均值的 *Ehrenfest* 定律与绘景无关。

以下没有特殊说明，仍然在 *Schroedinger* 绘景讨论问题。

3. 一维线性谐振子的代数解法

对于任意势，在最小点 x_0 附近按 Taylor 展开

$$V(x)=V(x_0)+V'(x_0)(x-x_0)+\frac{1}{2}V''(x_0)(x-x_0)^2+\cdots$$



在能量本征方程中，哈密顿量的常数项 $V(x_0)$ 可以归并到能量中去，而在势能最小值点，有 $V'(x_0)=0$。故略去高阶项，有

$$V(x)=\frac{1}{2}V''(x_0)(x-x_0)^2,$$

是谐振子势。故研究谐振子问题具有普遍意义。

正则量子化：
$$\begin{cases}\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\\ [\hat{x},\ \hat{p}]=i\hbar\end{cases}$$

0) 由于
$$\hat{H}=\frac{m\omega}{2\hbar}\left(\hat{x}-\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)\hbar\omega+\frac{1}{2}\hbar\omega$$

定义新算符
$$\hat{a}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right),\qquad \hat{a}^+=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}-\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right),$$

则有
$$\begin{cases}\hat{H}=\left(\hat{a}^+\hat{a}+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega\\ \left[\hat{a},\ \hat{a}^+\right]=1\end{cases}。$$

显然，$\hat{a}$不是厄米算符，$\hat{a}^{+}\neq\hat{a}$。但$\hat{a}^{+}\hat{a}$是厄米算符，$\left(\hat{a}^{+}\hat{a}\right)^{+}=\hat{a}^{+}\hat{a}$。

由于$\hat{a}^{+}\hat{a}$与$\hat{H}$只差一个常数，故$\hat{a}^{+}\hat{a}$与$\hat{H}$有共同本征态。设

$$\hat{a}^{+}\hat{a}|n\rangle=n|n\rangle,$$

则
$$\hat{H}|n\rangle=E_n|n\rangle,\qquad E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega。$$

问题：本征值$n=$？坐标表象本征态$\langle x|n\rangle=\psi_n(x)=?$

1）设 $\hat{a}|n\rangle=|b\rangle$,

则 $\langle n|\hat{a}^{+}=\langle b|$,

$$\langle n|\hat{a}^{+}\hat{a}|n\rangle=\langle b|b\rangle,\quad n\langle n|n\rangle=\langle b|b\rangle$$

因为 $\langle b|b\rangle\geq 0,\quad \langle n|n\rangle\geq 0$,

故 $n\geq 0$。

2）因为
$$\left(\hat{a}^{+}\hat{a}\right)\hat{a}|n\rangle=\left(\hat{a}\hat{a}^{+}-1\right)\hat{a}|n\rangle=\hat{a}\left(\hat{a}^{+}\hat{a}-1\right)|n\rangle=(n-1)\hat{a}|n\rangle$$
$$\left(\hat{a}^{+}\hat{a}\right)\hat{a}^{+}|n\rangle=\hat{a}^{+}\hat{a}\hat{a}^{+}|n\rangle=\hat{a}^{+}\left(\hat{a}^{+}\hat{a}+1\right)|n\rangle=(n+1)\hat{a}^{+}|n\rangle$$

说明，如果$|n\rangle$是$\hat{a}^{+}\hat{a}$的本征态，则$\hat{a}|n\rangle$，$\hat{a}^{+}|n\rangle$也是$\hat{a}^{+}\hat{a}$的本征态，

$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ 的本征态	$\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ 的本征值
$\vdots$	$\vdots$
$\left(\hat{a}^{+}\right)^{2}|n\rangle$	$n+2$
$\hat{a}^{+}|n\rangle$	$n+1$
$|n\rangle$	n
$\hat{a}|n\rangle$	$n-1$
$(\hat{a})^{2}|n\rangle$	$n-2$
$\vdots$	$\vdots$

故称$\hat{a}$为下降（消灭）算符，$\hat{a}^{+}$为上升（产生）算符。结合$n\geq 0$的结论，$\hat{a}^{+}\hat{a}$

的本征值为

$$n = n_0, n_0+1, n_0+2, \cdots \qquad n_0 \geq 0$$

3） 对于最小值n_0，如果$\hat{a}|n_0\rangle \neq 0$，对应的本征值为$n_0-1$，与$n_0$为最小本征值的假设矛盾，故必须$\hat{a}|n_0\rangle = 0$，即$\hat{a}^+\hat{a}|n_0\rangle = 0$，

由定义 $\qquad \hat{a}^+\hat{a}|n_0\rangle = n_0|n_0\rangle$，

有 $\qquad n_0 = 0$。

结论 $\qquad E_n = \left(n+\dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad n = 0,1,2,\cdots$，

注意，到此仅仅用到了对易关系，没有进入具体表象。

4) 由于$\hat{a}|n\rangle$与$|n-1\rangle$都是$\hat{a}^+\hat{a}$的对应本征值为$n-1$的本征态，如果无简并（一维束搏态无简并），有

$$\hat{a}|n\rangle = a_n|n-1\rangle, \quad \langle n|\hat{a}^+ = \langle n-1|a_n^*,$$

同理 $\qquad \hat{a}^+|n\rangle = b_n|n+1\rangle, \quad \langle n|\hat{a} = \langle n+1|b_n^*,$

故 $\qquad \langle n|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = |a_n|^2\langle n-1|n-1\rangle, \quad n = |a_n|^2, \quad |a_n| = \sqrt{n},$

$$\langle n|\hat{a}\hat{a}^+|n\rangle = |b_n|^2\langle n+1|n+1\rangle, \quad \langle n|\hat{a}^+\hat{a}+1|n\rangle = |b_n|^2, \quad |b_n| = \sqrt{n+1}$$

取 $\qquad a_n = \sqrt{n}, \quad b_n = \sqrt{n+1}$。

$$\begin{cases} \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \\ \hat{a}^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{cases}$$。

5）$\hat{H}$与$\hat{a}^+\hat{a}$的共同表象

$$\left(a^+a\right)_{mn} = \langle m|\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = n\langle m|n\rangle = n\delta_{mn},$$

$$H_{mn} = \langle m|\hat{H}|n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\delta_{mn}$$

均为对角矩阵，这不难理解，因为是在自身表象。

$$a_{mn} = \langle m|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\langle m|n-1\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1},$$

$$a_{mn}^{+} = \langle m|\hat{a}^{+}|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}$$

因为 $$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}+\hat{a}^{+}\right), \qquad \hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\hat{a}-\hat{a}^{+}\right),$$

则 $$x_{mn} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a_{mn}+a_{mn}^{+}\right) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1}+\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\right)$$

$$p_{mn} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\sqrt{n}\delta_{m,n-1}-\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}\right),$$

均不是对角阵。注意

$$\langle n|\hat{x}|n\rangle = \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0 \text{。}$$

6）进入坐标表象

对于基态 $|0\rangle$， $\hat{a}|0\rangle = 0$,

即 $$\left(\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)|0\rangle = 0,$$

$$\langle x|\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}|0\rangle = 0,$$

$$\int dx'\langle x|\hat{x}+\frac{i}{m\omega}\hat{p}|x'\rangle\langle x'|0\rangle = 0,$$

因为 $$\langle x|\hat{x}|x'\rangle = x\delta\left(x-x'\right), \qquad \langle x|\hat{p}|x'\rangle = -i\hbar\delta\left(x-x'\right)\frac{d}{dx},$$

令 $$\langle x'|0\rangle = \psi_0\left(x'\right),$$

有 $$\left(x+\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)\psi_0\left(x\right) = 0,$$

$$\psi_0\left(x\right) = Ce^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2},$$

归一化 $$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi_0(x)\right|^2 dx = 1,$$

有 $$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}。$$

激发态

$$\begin{aligned}
\psi_n(x) &= \langle x|n\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n}}\langle x|\hat{a}^+|n-1\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}}\langle x|\left(\hat{a}^+\right)^2|n-2\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|\left(\hat{a}^+\right)^n|0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{n}{2}}\langle x|\left(\hat{x}-\frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)^n|0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{n}{2}}\int dx_1\cdots dx_n\langle x|\hat{x}-\frac{i}{m\omega}\hat{p}|x_1\rangle\cdots\langle x_{n-1}|\hat{x}-\frac{i}{m\omega}\hat{p}|x_n\rangle\langle x_n|0\rangle
\end{aligned}$$

代入 $$\langle x'|\hat{x}|x''\rangle = x'\delta(x-x''),\quad \langle x'|\hat{p}|x''\rangle = -i\hbar\delta(x-x'')\frac{d}{dx'},$$

有 $$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{n}{2}}\left(x-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx}\right)^n\psi_0(x)$$

至此，一维谐振子问题全部解决。

7）$\hat{a}^+\hat{a}$ 的物理意义

谐振子的能量 $$E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\qquad n = 0,1,2,3\cdots$$

其中基态能量是 $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$，两相邻能级的差别是 $\hbar\omega$。**可以认为，体系中存在**

一种量子，能量为$\varepsilon=\hbar\omega$，凝聚在基态。当有n个量子被激发时，谐振子处于第n个激发态。

n：量子数，粒子数；

$\hat{N}=\hat{a}^{+}\hat{a}$是粒子数算符，$\hat{a}$是粒子消灭算符，$\hat{a}^{+}$是粒子产生算符。

$\hat{H}$和$\hat{N}$的共同表象：粒子数表象。

总结代数解法的思路：

束缚态$\rightarrow$分离谱$\rightarrow$寻找分离量子数的下降、上升算符。

粒子数表象是二次量子化方案的基础。