3.13.2 Schrödinger 和Heisenberg 绘景(picture)

引入时间演化算符$U(t,0)$

$$|\alpha(t)\rangle = U(t,0)|\alpha(0)\rangle \tag{3.332}$$

那么根据薛定鄂方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,0)|\alpha(0)\rangle = HU(t,0)|\alpha(0)\rangle \tag{3.333}$$

由于初态任意,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,0) = HU(t,0) \tag{3.334}$$

这是个算符的时间演化方程，表明$U(t,0)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}$. 即

$$U(t,0) = \sum_n(\frac{-\mathrm{i}Ht}{\hbar})^n/n! \tag{3.335}$$

由于$H^\dagger = H$, 所以$U^\dagger(t,0)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}$.

$$U^\dagger(t,0)U(t,0) = U(t,0)U^\dagger(t,0) = 1 \tag{3.336}$$

$U(t,0)$是幺正算符。

$U(t,0)|\alpha(0)\rangle$是$|\alpha(t)\rangle$, $\langle\alpha(0)|U^\dagger(t,0)$ 是$|\alpha(t)\rangle$的左矢. 由于

$$\langle\alpha(0)|U^\dagger(t,0)|\alpha(t)\rangle = 1, \tag{3.337}$$

也可以理解为$U^\dagger(t,0)|\alpha(t)\rangle$将$|\alpha(t)\rangle$时光倒流回$|\alpha(0)\rangle$态.

计算任意力学量A的期望值

$$\langle A\rangle = (\langle\alpha(0)|U^\dagger(t,0))A(U(t,0)|\alpha(0)\rangle) = \langle\alpha(0)|U^\dagger(t,0)AU(t,0)|\alpha(0)\rangle \tag{3.338}$$

定义

$$A_H(t) \equiv U^\dagger(t,0)AU(t,0) \tag{3.339}$$

此即Heisenberg picture下的A算符. 原来的算符可以理解为A_S, 即Schrödinger Picture下的算符.

Heisenberg Picture 规定：态矢不随时间演化, 一直是$|\alpha(0)\rangle$, 但是力学量随时间演化。

与此相反，Schrödinger Picture 下，态矢随时间演化，但力学量的算符本身不演化, $A_s(t) = A$.

两种Picture下，力学量的期望值是一样的。

我们从另一个角度看,

$$\begin{aligned}\frac{dA_H}{\mathrm{d}t} &= \frac{\partial U^\dagger}{\partial t}A_SU + U^\dagger A_S\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{-\mathrm{i}\hbar}U^\dagger HA_SU + U^\dagger A_S\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}HU \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(U^\dagger A_SUU^\dagger HU - U^\dagger HUU^\dagger A_SU)\end{aligned} \tag{3.340}$$

由于$[H,U]=0$, 所以$U^\dagger HU = H$, 即$H_H = H_S$.

$$\frac{dA_H}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[A_H, H] \tag{3.341}$$

此即Heisenberg运动方程。它起到Schrödinger 方程一样的作用。

例子：H picture下对一维谐振子的运动的描述。

$x_H = U^\dagger xU$, $p_H = U^\dagger pU$.

满足

$$\dot{x}_H = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[x_H, H] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}U^\dagger[x,H]U = \frac{p_H}{m} \tag{3.342}$$

同样

$$\dot{p}_H = -m\omega^2 x_H \tag{3.343}$$

以上两式与经典方程形式上是一样的！区别是现在是算符的方程。

容易解出：

$$x_H(t) = c_1 \cos\omega t + c_2 \sin\omega t \tag{3.344}$$

$$p_H(t) = -m\omega c_1 \sin\omega t + m\omega c_2 \cos\omega t \tag{3.345}$$

注意这里c_1, c_2是不随时间变化的算符。

由$x_H(0) = x_S = x$, 得到$c_1 = x$; 由$p_H(0) = p_S$, 得$c_2 = p_S/m\omega = -i\hbar\frac{\partial}{m\omega\partial x}$.

如果想计算某个时刻的动量或位置期望值，或者测量几率，我们仍然需要知道初始时刻的量子态！

例如，粒子的初态为$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x)$. 在Schrödinger Picture 下，我们写出$\psi(t)$. 计算$\langle x\rangle$.

$$\psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-i\omega t/2}\psi_0(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\mathrm{e}^{-i3\omega t/2}\psi_1(x) \tag{3.346}$$

利用(3.249)和(3.250), 容易算出

$$\langle x\rangle(t) = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\cos(\omega t) \tag{3.347}$$

在Heisenberg Picture 下，我们写出$x_H(t)$, 然后计算$\langle x\rangle$.

利用初始条件$c_1 = x_S, c_2 = p_S/m\omega$, 计算初态下期望值$\langle x_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}$, $\langle p_S\rangle = 0$, 根据Eq. (3.344), 我们得到

$$\langle x_H(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\cos(\omega t) \tag{3.348}$$

结果都是一样的。

最后再看第3.6节中讨论过的自旋在均匀磁场中的进动问题。根据$H = \hbar\omega_L\sigma_x/2$，我们写成自旋的Heisenberg 运动方程:

$$\begin{aligned}
\frac{dS_x}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[S_x, H] = 0,\\
\frac{dS_y}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[S_y, H] = -\omega_L S_z,\\
\frac{dS_z}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[S_z, H] = \omega_L S_y
\end{aligned} \tag{3.349}$$

其中算符都是在Heisenberg 绘景, 我省略了下标H. 在计算对易式时,用到

$$[S_y, H] = U^\dagger(t)[S_y(0), H]U(t) = -U^\dagger(t)\omega_L i\hbar S_z(0)U(t) = -i\hbar\omega_L S_z \tag{3.350}$$

此方程跟我们之前用到的经典方程(3.134)一致！其解为

$$\begin{aligned}
S_x(t) &= S_x(0),\\
S_y(t) &= S_y(0)\cos(\omega_L t) - S_z(0)\sin(\omega_L t),\\
S_z(t) &= S_z(0)\cos(\omega_L t) + S_y(0)\sin(\omega_L t)
\end{aligned} \tag{3.351}$$

根据初始条件$|\alpha(0)\rangle = |+, z\rangle$, 利用$\langle +, z|S_x(0)|+, z\rangle = \langle +, z|S_y(0)|+, z\rangle = 0$, 容易算出

$$\langle S_x(t)\rangle = 0, \tag{3.352}$$

$$\langle S_y(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\sin(\omega_L t), \tag{3.353}$$

$$\langle S_z(t)\rangle = \frac{\hbar}{2}\cos(\omega_L t). \tag{3.354}$$

与Schrödinger picture下以及经典物理计算一致.

3.14 升降算符法

3.14.1 求解一维谐振子问题

之前我们在坐标表象求解了一维谐振子的定态方程（微分方程）

$$H\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \tag{3.355}$$

现在我们介绍代数方法。

引入

$$\begin{aligned} Q &= \alpha x = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \\ P &= \frac{p}{\hbar\alpha} = \frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}} \end{aligned} \tag{3.356}$$

P与Q满足

$$[Q, P] = \mathrm{i}, \tag{3.357}$$

这里利用了$1/\alpha$是特征长度，$\hbar\alpha$是特征动量。并且

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(P^2 + Q^2) \tag{3.358}$$

定义$a \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(Q + \mathrm{i}P), a^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(Q - \mathrm{i}P)$. 注意$a \neq a^\dagger$, 不是厄密的。

容易得到

$$[a, a^\dagger] = 1, \tag{3.359}$$

$$a^\dagger a = \frac{1}{2}(P^2 + Q^2 - 1). \tag{3.360}$$

于是

$$H = (a^\dagger a + \frac{1}{2})\hbar\omega. \tag{3.361}$$

假设我们不知道H的本征值是$(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$, 也不知道$H$的本征态是$\psi_n = N_n \mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} H_n(\alpha x)$. 我们来求解

$$H|n\rangle = \lambda_n|n\rangle \tag{3.362}$$

由于$[a, H] = [a, a^\dagger a]\hbar\omega = a\hbar\omega$,

$$Ha|n\rangle = (aH - \hbar\omega a)|n\rangle = (\lambda_n - \hbar\omega)a|n\rangle \tag{3.363}$$

即$a|n\rangle$也是H的本征态，属于本征值$\lambda_n - \hbar\omega$. 同理, $\lambda_n - 2\hbar\omega, \lambda_n - 3\hbar\omega, \cdots$,都是本征值, 对应本征态是$a^2|n\rangle, a^3|n\rangle, \cdots$.

由于

$$\langle\psi|H|\psi\rangle = \langle\psi|a^\dagger a|\psi\rangle + \frac{1}{2}\hbar\omega \geq 0 \tag{3.364}$$

所以**本征值一定有个最小值λ_0, 对应的本征态$|0\rangle$满足$a|0\rangle = 0$.**

$$H|0\rangle = \hbar\omega a^\dagger a|0\rangle + \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle. \tag{3.365}$$

因此$\lambda_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. 所有的能级也确定了：$\lambda_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$.

利用$[a^\dagger, H] = -a^\dagger\hbar\omega$, 可以推出$a^\dagger|n\rangle$是H的本征态，本征值为$\lambda_n + \hbar\omega$.

$a^\dagger|n\rangle$会不会等于零？不会，我们反证之. 假设对于某个$|n\rangle$, $a^\dagger|n\rangle = 0$。由于

$$H = (aa^\dagger - \frac{1}{2})\hbar\omega \tag{3.366}$$

所以

$$H|n\rangle = \hbar\omega aa^\dagger|n\rangle - \hbar\omega|n\rangle = -\frac{1}{2}\hbar\omega|n\rangle \tag{3.367}$$

违背了(3.364): 任意状态的能量期望值大于等于零. 因此$n = 0, 1, 2, \cdots$, 没有上限。

注意到

$$a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle \tag{3.368}$$

所以$a^\dagger a$是量子数算符。

$a|n\rangle$是能量本征态，且根据Eq.(3.363), $a|n\rangle$等价于$|n-1\rangle$(考虑到一维束缚态没有简并.) 但是并不一定是归一化的本征态。我们设

$$a|n\rangle = c(n)|n-1\rangle, \tag{3.369}$$

那么

$$\langle n|a^\dagger = c^*(n)\langle n-1|. \tag{3.370}$$

同样，$a^\dagger|n\rangle = d(n)|n+1\rangle$, 所以$\langle n|a = d^*(n)\langle n+1|$. 计算

$$\langle n|a^\dagger a|n\rangle = |c(n)|^2 = n \tag{3.371}$$

$$\langle n|aa^\dagger n\rangle = |d(n)|^2 = n+1 \tag{3.372}$$

我们得到

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \qquad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{3.373}$$

或者

$$a^\dagger|n-1\rangle = \sqrt{n}|n\rangle \tag{3.374}$$

我们可以利用$a|0\rangle = 0$来确定基态波函数。根据a的定义，我们知道在坐标表象下

$$(\frac{i}{\hbar\alpha}\frac{-i\hbar\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \alpha x)\psi_0(x) = 0 \tag{3.375}$$

即

$$(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \alpha^2 x)\psi_0(x) = 0 \tag{3.376}$$

得

$$\psi_0(x) = N_0 \mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} \tag{3.377}$$

归一化，可以定出N_0.

再利用$a^\dagger|0\rangle = |1\rangle$,

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha x - \frac{1}{\alpha}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x})\psi_0(x) = N_1\alpha x\mathrm{e}^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}} \tag{3.378}$$

普遍地,

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n}}a^\dagger\psi_{n-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{2n}}(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi})\psi_{n-1} \tag{3.379}$$

其中

$$\xi = \alpha x \tag{3.380}$$

依次类推

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{N_0}{2^n n!}}(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi})^n\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \equiv N_n H_n(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \tag{3.381}$$

下降算符a的本征态非常重要，称作**相干态**(coherent state):

$$a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle. \tag{3.382}$$

其中本征值习惯上写为α，由于a不是厄米算符，所以α为一个复数(注意不是前面的$\alpha=\sqrt{m\omega/\hbar}$). 设

$$|\alpha\rangle=\sum_{n=0}^{\infty}C_n(\alpha)|n\rangle \tag{3.383}$$

所以

$$a|\alpha\rangle=\sum_n C_n(\alpha)\sqrt{n}|n-1\rangle=\alpha\sum_n C_n(\alpha)|n\rangle \tag{3.384}$$

比较求和中$|n-1\rangle$项系数,

$$C_n(\alpha)=\frac{\alpha}{\sqrt{n}}C_{n-1}(\alpha)=\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}C_0(\alpha) \tag{3.385}$$

考虑归一化

$$\langle\alpha|\alpha\rangle=|C_0|^2\sum_n\frac{|\alpha|^2}{n!}=1 \tag{3.386}$$

其中求和为$\mathrm{e}^{|\alpha|^2}$, 所以

$$C_0=\mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \tag{3.387}$$

$$|\alpha\rangle=C_0(\alpha)\sum_n\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{3.388}$$

粒子处于$|n\rangle$的几率

$$|C_n|^2=\frac{|\alpha|^{2n}}{n!}\mathrm{e}^{-|\alpha|^2} \tag{3.389}$$

为泊松分布. 容易算出$\langle\alpha|a^+a|\alpha\rangle=|\alpha|^2$, a^+a的标准偏差为$|\alpha|$。

如果零时刻粒子处于$|\alpha\rangle$, 那么t时刻就是

$$|t\rangle=C_0\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t/2}\sum_n\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega nt} \tag{3.390}$$

$$\langle x(t)\rangle=\frac{x_0}{\sqrt{2}}\langle(a+a^+)\rangle=\sqrt{2}|\alpha|x_0\cos(\omega t+\phi) \tag{3.391}$$

(ϕ 是初相，由α决定, $x_0=\sqrt{\hbar/m\omega}$是谐振子特征长度). 标准偏差多大? 为什么说相干态最接近经典状态?

矩阵表示

我们来计算能量表象下各算符的矩阵形式

根据Eq(3.373),

$$a_{n-1,n}=\langle n-1|a|n\rangle=\sqrt{n} \tag{3.392}$$

$$a^\dagger_{n+1,n}=\langle n+1|a^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1} \tag{3.393}$$

即矩阵元为$a_{n,m}=\sqrt{m}\delta_{n+1,m}, a^\dagger_{n,m}=\sqrt{m+1}\delta_{n-1,m}$. 注意，$n,m=0,1,2,\cdots$.

利用

$$Q=\frac{1}{\sqrt{2}}(a+a^\dagger P=\frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger-a) \tag{3.394}$$

容易得到

$$Q_{n,m}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\sqrt{m}\delta_{n+1,m}+\sqrt{m+1}\delta_{n-1,m}) \tag{3.395}$$

$$P_{n,m}=\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(\sqrt{m+1}\delta_{n-1,m}-\sqrt{m}\delta_{n+1,m}) \tag{3.396}$$

$x_{n,m}, p_{n,m}$也就得到了。