量子力学 II 作业 7

姓名: 郑晓旸
学号: 202111030007

2025 年 4 月 29 日

问题

证明量子力学中的传播子 $U(x',t';x,t) = \langle x'|e^{-iH(t'-t)/\hbar}|x\rangle$ 具有以下性质（假设哈密顿量 H 不显含时间）:

1. 传播子可以写为能量本征态的展开形式:

$$U(x',t';x,t) = \sum_a \langle x'|a\rangle\langle a|x\rangle e^{-iE_a(t'-t)/\hbar}$$

   其中 $H|a\rangle = E_a|a\rangle$，且 $|a\rangle$ 构成完备正交基。

2. 传播子 $U(x',t';x,t)$ 作为 x', t' 的函数（固定 x, t）满足含时薛定谔方程:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}U(x',t';x,t) = H_{x'}U(x',t';x,t)$$

   其中 $H_{x'}$ 是作用在 x' 坐标上的哈密顿量算符。

3. 传播子满足初始条件:

$$\lim_{t'\to t} U(x',t';x,t) = \delta(x'-x)$$

证明

1. 传播子的能谱展开

我们从传播子的定义开始:

$$U(x',t';x,t) = \langle x'|e^{-iH(t'-t)/\hbar}|x\rangle$$

在算符和末态 $\langle x'|$ 之间插入能量本征态的完备性关系 $I = \sum_a |a\rangle\langle a|$:

$$U(x',t';x,t) = \langle x'|\left(\sum_a |a\rangle\langle a|\right)e^{-iH(t'-t)/\hbar}|x\rangle$$

由于 H 与其自身的函数对易，即 $[H, e^{-iH(t'-t)/\hbar}] = 0$，我们可以将演化算符作用在插入的基矢上：

$$U(x',t';x,t) = \sum_a \langle x'|a\rangle\langle a|e^{-iH(t'-t)/\hbar}|x\rangle$$

现在在算符和初态 $|x\rangle$ 之间再次插入完备性关系 $I = \sum_b |b\rangle\langle b|$（使用不同下标以示区分）：

$$U(x',t';x,t) = \sum_a \langle x'|a\rangle\langle a|e^{-iH(t'-t)/\hbar}\left(\sum_b |b\rangle\langle b|\right)|x\rangle$$

$$U(x',t';x,t) = \sum_{a,b} \langle x'|a\rangle\langle a|e^{-iH(t'-t)/\hbar}|b\rangle\langle b|x\rangle$$

演化算符作用在能量本征态 $|b\rangle$ 上：

$$e^{-iH(t'-t)/\hbar}|b\rangle = e^{-iE_b(t'-t)/\hbar}|b\rangle$$

代入上式：

$$U(x',t';x,t) = \sum_{a,b} \langle x'|a\rangle\langle a|\left(e^{-iE_b(t'-t)/\hbar}|b\rangle\right)\langle b|x\rangle$$

$$U(x',t';x,t) = \sum_{a,b} e^{-iE_b(t'-t)/\hbar}\langle x'|a\rangle\langle a|b\rangle\langle b|x\rangle$$

利用能量本征态的正交归一性 $\langle a|b\rangle = \delta_{ab}$：

$$U(x',t';x,t) = \sum_{a,b} e^{-iE_b(t'-t)/\hbar}\langle x'|a\rangle\delta_{ab}\langle b|x\rangle$$

求和中只有 $b = a$ 的项不为零：

$$U(x',t';x,t) = \sum_a e^{-iE_a(t'-t)/\hbar}\langle x'|a\rangle\langle a|x\rangle$$

这即是所要证明的表达式。通常也写作波函数形式：

$$U(x',t';x,t) = \sum_a \psi_a(x')\psi_a^*(x)e^{-iE_a(t'-t)/\hbar}$$

证明完毕。

2. 传播子满足薛定谔方程

考虑传播子对末态时间 t' 的偏导数：

$$\frac{\partial}{\partial t'}U(x',t';x,t) = \frac{\partial}{\partial t'}\langle x'|e^{-iH(t'-t)/\hbar}|x\rangle$$

导数作用在时间演化算符上：

$$\frac{\partial}{\partial t'}e^{-iH(t'-t)/\hbar} = e^{-iH(t'-t)/\hbar}\left(\frac{-iH}{\hbar}\right)$$

因此：

$$\frac{\partial}{\partial t'}U(x',t';x,t) = \langle x'|e^{-iH(t'-t)/\hbar}\left(\frac{-iH}{\hbar}\right)|x\rangle$$

两边乘以 $i\hbar$：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}U(x',t';x,t) = \langle x'|e^{-iH(t'-t)/\hbar}H|x\rangle$$

由于 $[H, e^{-iH(t'-t)/\hbar}] = 0$，我们可以将 H 移到左边作用在 $\langle x'|$ 上：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}U(x',t';x,t) = \langle x'|He^{-iH(t'-t)/\hbar}|x\rangle$$

在位置表象中，算符 H 作用在左矢 $\langle x'|$ 上，等价于坐标表示下的哈密顿量算符 $H_{x'}$（例如 $H_{x'} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{x'}^2 + V(x')$）作用在 $\langle x'|$ 后面的态函数上。即对于任意态 $|\psi\rangle$，有 $\langle x'|H|\psi\rangle = H_{x'}\langle x'|\psi\rangle$。令 $|\psi(t',t)\rangle = e^{-iH(t'-t)/\hbar}|x\rangle$，则：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}U(x',t';x,t) = H_{x'}\langle x'|e^{-iH(t'-t)/\hbar}|x\rangle$$

右边的矩阵元正是传播子 $U(x',t';x,t)$ 的定义：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t'}U(x',t';x,t) = H_{x'}U(x',t';x,t)$$

证明完毕。

3. 传播子的初始条件

考察极限 $t' \to t$：

$$\lim_{t'\to t}U(x',t';x,t) = \lim_{t'\to t}\langle x'|e^{-iH(t'-t)/\hbar}|x\rangle$$

当 $t' \to t$ 时，指数 $-iH(t'-t)/\hbar \to 0$。因此，时间演化算符趋于单位算符 I：

$$e^{-iH(t'-t)/\hbar} \xrightarrow{t'\to t} e^0 = I$$

所以：

$$\lim_{t'\to t}U(x',t';x,t) = \langle x'|I|x\rangle = \langle x'|x\rangle$$

根据位置本征态的正交归一性，其内积为狄拉克 δ 函数：

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x'-x)$$

因此：

$$\lim_{t'\to t}U(x',t';x,t) = \delta(x'-x)$$

证明完毕。