8：由薛定谔方程支配的系统随时间演化

#Quantum_Mechanics

首先我们要说明，在量子力学的模型中，时间只是一个参数，而不是和动量、坐标等平权的一个算符。换言之，时间是不可以被观测的。在相对论性量子力学中，时间和坐标确实是平权的，但这只不过是因为时间被降级为了一个"参数"。

时间演化算符

我们现在要看一个右矢如何随着时间演化。假设一个系统在 t_0 时刻的态矢为 α，那么我们将系统 t 时刻的态矢记为 $|\alpha_0;t\rangle$。正如平移算符一样，我们要定义一个时间演化算符（有的地方称之为"传播子"）：

$$|\alpha,t_0;t\rangle=\mathscr{U}(t,t_0)|\alpha,t_0;t_0\rangle$$

我们来研究 $\mathscr{U}$ 的性质，为此将 $|\alpha\rangle$ 在算符 A 的基底上展开：

$$|\alpha,t_0\rangle=\sum_{a'}c_{a'}(t_0)|a'\rangle\quad|\alpha,t_0;t\rangle=\sum_{a'}c_{a'}(t)|a'\rangle$$

由于概率归一化的特性，我们要求 $|\alpha,t_0;t\rangle$ 的模长不变，因此我们自然要求 $\mathscr{U}$ 和空间平移算符一样是幺正的：

$$\mathscr{U}^\dagger(t,t_0)\mathscr{U}(t,t_0)=1$$

我们自然还要求 $\mathscr{U}$ 有以下性质：

$$\mathscr{U}(t_0,t_1)\mathscr{U}(t_1,t_2)=\mathscr{U}(t_0,t_2)$$

一个简单的分析方式仍然是考虑无穷小时间演化：

$$|\alpha,t_0;t_0+dt\rangle=\mathscr{U}(t_0+dt)|\alpha;t_0\rangle$$

我们希望：

$$\lim_{dt\to0}\mathscr{U}(t_0+dt,t_0)=\mathbf{1}$$

根据前面平移算符的性质，我们希望这样生成时间演化算符：

$$\mathscr{U}(t_0+dt,t_0)=1-i\Omega dt$$

其中 Ω 是一个厄米算符。注意到算符 Ω 有频率量纲，为了便于使用，我们显然可以把它和哈密顿量算符联系起来：$\Omega=\dfrac{H}{\hbar}$。因此，时间演化算符可以被写为：

$$\mathscr{U}(t_0+dt,t_0)=1-\frac{iHdt}{\hbar}$$

有人可能会问：这里的 $\hbar$ 和之前平移算符中的一样吗？答案是一样的，因为只有这样，我们才能从量子力学正确地回归到经典力学中。

薛定谔方程

所有的先验假设已经在时间演化算符的形式中准备好，现在我们可以推导支配着时间演化算符演化的微分方程。利用无穷小时间演化我们有：

$$\mathscr{U}(t+dt,t_0)-\mathscr{U}(t,t_0)=-i\left(\frac{H}{\hbar}\right)dt\mathscr{U}(t,t_0)$$

那么我们立刻得到：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\mathscr{U}(t,t_0)=H\mathscr{U}(t,t_0)$$

这正是著名的**薛定谔方程**。我们也可以立刻得到关于态矢的方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t_0;t\rangle=H|\alpha,t_0;t\rangle$$

一件很基本的事情自然是给出以上方程的解，我们分三种情况：
情况 1：哈密顿算符不含时：我们可以立刻验证以下形式满足方程：

$$\mathscr{U}(t,t_0)=\exp\left[\frac{-iH(t-t_0)}{\hbar}\right]$$

这个形式也可以使用无穷个无穷小时间演化算符的复合得到。
情况 2：哈密顿算符含时，但是对于任意 t_1,t_2 有 $H(t_1)$ 和 $H(t_2)$ 对易，此时解的形式也很简单：

$$\mathscr{U}(t,t_0)=\exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\int_{t_0}^{t}dt'H(t')\right]$$

情况 3：$H(t_1)$ 和 $H(t_2)$ 不对易，此时这个解极其艰难：

$$\mathscr{U}(t,t_0)=1+\sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_2}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_nH(t_1)H(t_2)\cdots H(t_n)$$

能量本征矢

回顾对空间平移算符的研究，那个时候，我们直接声明平移算符会移动本征矢（至少在樱井纯这套书中，我们是这样定义平移算符的）。现在，我们也想看看时间演化算符作用在本征矢上是什么效果，我们指出在我们使用的算符 A 和 H 对易（也就是二者共享一套本征矢）的情况是简单的，我们将 H 的本征矢记为：

$$H|a'\rangle=E_{a'}|a'\rangle$$

我们向时间演化算符中插入完备性关系：

$$\begin{aligned}\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)&=\sum_{a'}\sum_{a''}|a''\rangle\langle a''|\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)|a'\rangle\langle a'|\\&=\sum_{a'}|a'\rangle\exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)\langle a'|\end{aligned}$$

这个情况下，我们很容易给出所有在 $|a'\rangle$ 上展开的算符的演化，例如：

$$|\alpha,t_0=0\rangle=\sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$$

那么：

$$|\alpha,t_0=0;t\rangle=\sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle\exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)$$

换言之，我们可以认为我们的基底没动，只有 $|\alpha\rangle$ 变了，这导致系数发生变化：

$$c_{a'}(t)=c_{a'(0)}\exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)$$

显然，如果系统开始就处于 A 的一个本征态上，那么它将一直处于本征态上。

期望值的时间独立性

如果系统处在一个能量本征态上，我们现在考虑一个可观测量的期望：

$$
\begin{aligned}
\langle B\rangle &= (\langle a'|\mathscr{U}^\dagger(t,0))\cdot B\cdot(\mathscr{U}(t,0)|a'\rangle) \\
&= \langle a'|\exp\left(\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)B\exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)|a'\rangle \\
&= \langle a'|B|a'\rangle
\end{aligned}
$$

显然它是与时间无关的！因此我们将能量本征态称为稳态。而对于其他的非稳态，我们可以计算：

$$
\langle B\rangle = \sum_{a'}\sum_{a''} c^\star_{a'}(0)c_{a''}(0)\langle a'|B|a''\rangle\exp\left[-\frac{i(E_{a''}-E_{a'})t}{\bar{h}}\right]
$$

我们可以看到，此时的观测量有一大堆简谐振动分量，每个分量的频率是：

$$
\omega_{a''a'} = \frac{E_{a''}-E_{a'}}{\hbar}
$$

这里是矩阵力学的诞生之地！

例子：自旋进动

我们考虑之前的二能级系统，它的哈密顿算符是：

$$
H = -\left(\frac{e}{m_0c}\right)S\cdot B
$$

我们设空间中有沿 z 轴正方向的静磁场，那么有：

$$
H = -\left(\frac{eB}{m_ec}\right)S_z
$$

显然，此时 S_z 的本征态就是所谓能量本征态，能量的本征值为：

$$
E_{+/-} = -/+\frac{ehB}{2m_ec}
$$

定义 $\omega = \dfrac{|e|B}{m_ec}$，那么立刻得到时间演化算符：

$$
\mathscr{U}(t,0) = \exp\left(-\frac{i\omega S_zt}{\hbar}\right)
$$

那么态矢的演化是：

$$|\alpha, t_0=0; t\rangle = c_+ \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right)|+\rangle + c_- \exp\left(+\frac{i\omega t}{2}\right)|-\rangle$$

对于 $c_+ = c_- = \dfrac{1}{\sqrt{2}}$ 的情况，系统出现在 $|S_{x+}\rangle$ 态上的概率是 $\cos^2\dfrac{\omega t}{2}$，出现在 $|S_{x-}\rangle$ 态上的概率自然是 $\sin^2\dfrac{\omega t}{2}$。因此，就算初始时观测到自旋一定出现在 $|S_{x+}\rangle$ 态上，但是自旋仍然会在两个态之间来回变换。我们可以写出平均值：

$$\langle S_x\rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right)\cos\omega t \quad \langle S_y\rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right)\cos\omega t \quad \langle S_z\rangle = 0$$

这意味着粒子的自旋在 $x-y$ 面内进动

例子：中微子振荡

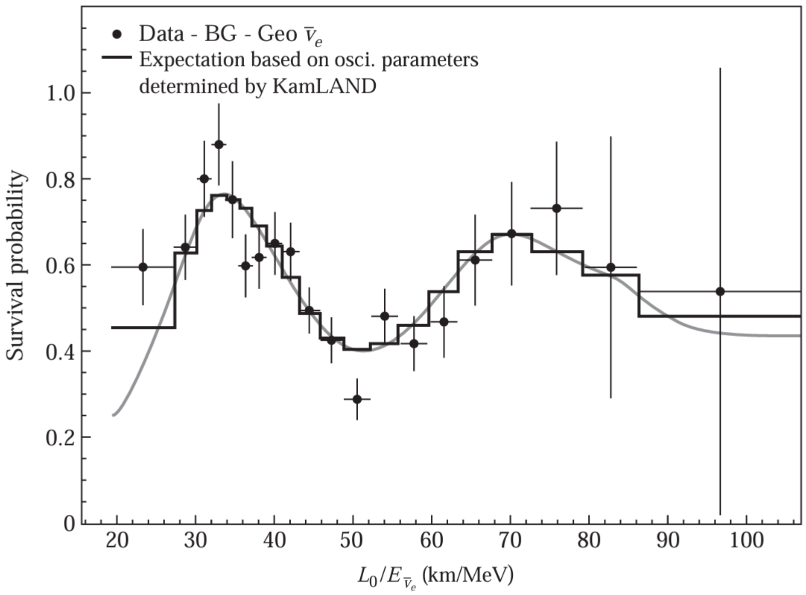
中微子是一种不带电荷的基本粒子，这里我们关注两种不同的"味"的中微子（它们以能否与电子发生相互作用以区分），我们将中微子的能量本征态（或者说是质量本征态）以 $|v_1\rangle, |v_2\rangle$ 表示，而它的“味”本征态表示为：

$$|v_e\rangle = \cos\theta|v_1\rangle - \sin\theta|v_2\rangle \quad |v_\mu\rangle = \sin\theta|v_1\rangle + \cos\theta|v_2\rangle$$

实际上对于这里 θ 的取值没有任何理论依据和先验，因此只能通过实验测得，而中微子振荡就是这里的 θ 随着时间变化的现象。由于这里的计算需要考虑一些相对论效应，这里我们直接给出计算的结果： 系统被观测到处于 $|v_e\rangle$ 态的概率是：

$$P(|v_e\rangle \to |v_e\rangle) = 1 - \sin^2 2\theta \sin^2\left(\Delta m^2 c^4 \frac{L}{4Ehc}\right)$$

这里 $L=ct$，是中微子飞过的距离。这个现象已经被实验观测到：



相关振幅和 $E-T$ 不确定性关系

最后，我们要探索不同时刻的态矢之间的相关性，我们的相关性是通过态矢量的内积定义的，我们将下式定义为相关振幅：

$$C(t)=\langle\alpha|\mathscr{U}(t,0)|\alpha\rangle$$

在 α 为某个能量本征矢时，$C(t)$ 只有模长变化：

$$C(t)=\langle a'|a',t_0=0,t\rangle=\exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)$$

而对于一般的情况：

$$C(t)=\sum_{a'}|c_{a'}|^2\exp\left(-\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)$$

为了估计上式的值，我们不妨假设能量本征矢是如此地密集，以至于上式可以被写成：

$$C(t)=\int dE|g(E)|^2\rho(E)\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

其中 $\rho(E)$ 是本征态的密度，由概率的归一化关系可得：

$$\int dE|g(E)|^2\rho(E)=1$$

在实际的物理情景中，本征态可能在某个 E_0 附近由比较密集的分布，因此我们将上式写为：

$$C(t)=\exp\left(-\frac{iE_0t}{\hbar}\right)\int dE|g(E)|^2\rho(E)\exp\left(-\frac{i(E-E_0)t}{\hbar}\right)$$

我们认为在 $t=\dfrac{\hbar}{\Delta E}$ 的时候，$C(t)$ 就显著地与 1 不同，因此我们有时间和能量的不确定性关系：

$$\Delta t\Delta E=\hbar$$

注意：这与之前的不确定性关系有本质性的区别，这里的 ΔE 是某种特征能量宽度，Δt 只是系统状态与初态出现较大区别的一个特征时间。