9：薛定谔绘景与海森堡绘景

#Quantum_Mechanics

我们首先再聊一聊幺正算符。到现在为止，我们已经遇到了两个幺正算符：平移算符 $\mathscr{T}(dx)$ 和时间演化算符 $\mathscr{U}(t,t_0)$，由此可见，幺正算符可以用来表示态矢量的某种演化。幺正算符最重要的性质是它是等距同构：

$$\langle\beta|\alpha\rangle \to \langle\beta|U^\dagger U|\alpha\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle$$

我们考虑：

$$\langle\beta|X|\alpha\rangle \to (\langle\beta|U^\dagger)\cdot X\cdot(U|\alpha\rangle) = \langle\beta|U^\dagger XU|\alpha\rangle$$

这个式子可以做两种不同的解释：

- 态矢发生演化 $|\alpha\rangle \to U|\alpha\rangle$，而算符不变
- 算符发生了演化 $X \to U^\dagger XU$，而态矢不变！
  在经典物理中，我们根本没有引入态矢量，这是因为我们所说的“平移”或者“时间演化”是对可观测量 x,p,L 等等的变换，因此我们猜测“倒反天罡”的解释 2 会不会和经典物理更加相似？我们举个例子，考虑态势的无穷小平移：

  $$|\alpha\rangle \to \left(1-\frac{iP\cdot dx'}{\hbar}\right)|\alpha\rangle$$

  如果我们按照第二个解释来写，我们就要对 X 做变换：

  $$X \to \left(1+\frac{iP\cdot dx'}{\hbar}\right)X\left(1-\frac{iP\cdot dx'}{\hbar}\right) = X+\left(\frac{i}{\hbar}\right)[P\cdot dx', X] = X+dX'$$

  可以证明，这个变换其实把 X 的均值也做了变换：

  $$\langle X\rangle \to \langle X\rangle + \langle X+dX'\rangle$$

  因此这个变换形式是合理的。

我们将第一种理解（态矢变化，算符不变）称为薛定谔绘景，将第二种理解（算符变化，态矢不变）称为海森堡绘景。根据上面的分析，我们仍然定义时间演化算符：

$$\mathcal{U}(t,t_0=0) = \mathcal{U}(t) = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)$$

那么海森堡绘景下算符随时间的演化就是：

$$A^{(H)}(t)=\mathscr{U}^{\dagger}(t)A^{(s)}\mathscr{U}(t)$$

一定注意海森堡绘景中的态矢是不含时的。计算两种绘景下的期望：

$$\langle\alpha;t=0|\mathscr{U}^{\dagger}(t)A\mathscr{U}(t)|\alpha;t=0\rangle=\langle\alpha;t|A|\alpha;t\rangle$$

因此两种情况下的期望是相等的。

现在我们导出薛定谔绘景下，时间演化算符满足的运动方程：

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}A^{(H)}}{\mathrm{d}t}&=\frac{\partial\mathscr{U}^{\dagger}}{\partial t}A^{(s)}\mathscr{U}+\mathscr{U}^{\dagger}A^{(S)}\frac{\partial\mathscr{U}}{\partial t}\\&=-\frac{1}{i\hbar}\mathscr{U}^{\dagger}H\mathscr{U}\mathscr{U}^{\dagger}A^{(S)}\mathscr{U}+\frac{1}{i\hbar}\mathscr{U}^{\dagger}A6(S)\mathscr{U}\mathscr{U}^{\dagger}H\mathscr{U}\\&=\frac{1}{i\hbar}[A^{(H)},\mathscr{U}^{\dagger}H\mathscr{U}]\end{aligned}$$

我们显然应该将海森堡绘景下的 H 定义为：

$$H^{(H)}=\mathscr{U}^{\dagger}H^{(S)}\mathscr{U}$$

但是由于 H 和 $\mathscr{U}$ 对易，那么我们得到 $H^{(H)}=H^{(S)}$，也就是说哈密顿算符（或者说，所有和时间演化算符对易的算符）在海森堡绘景下都是很特殊的，它们不随着时间变化，都和薛定谔绘景中的情况一致。因此：

$$\frac{\mathrm{d}A^{(H)}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}[A^{(H)},H]$$

我们可以与经典哈密顿方程对比：对于任意不含时的物理量 A，它的演化方程为：

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t}=[A,H]_{classical}$$

注意海森堡运动方程可以对任何观测量成立，比如自旋在经典物理里面没有对应，但是它的演化也可以使用海森堡方程描述。显然，无论我们是用薛定谔绘景还是海森堡绘景求解系统的演化，我们首先要知道哈密顿量算符 H 的正确形式。对于在经典情境下有类比的系统，比如谐振子，我们可以直接将经典的 x,p 用算符替代来实现量子化，但是注意哈密顿算符必须是厄米的，例如我们应该将 px 量子化为 $\frac{1}{2}(XP+PX)$。对于没有经典类比的系统，其实物理学家也没有什么好办法，我们只能猜测 H 的形式，直到与实验观测结果一致为止。

现在我们给出两个有关对易括号的结论：

$$[X_i, F(P)] = i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_i} \quad [P_i, G(X)] = -i\hbar\frac{\partial G}{\partial x_i}$$

注意这里 $F(P)$ 和 $G(X)$ 是用级数展开的方式定义的。现在让我们先在自由粒子身上使用以下海森堡方程，它的哈密顿量是：

$$H = \frac{P^2}{2m} = \frac{(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2)}{2m}$$

那么 H 只是 P 的函数，因此立刻得到 P 和 H 对易，也就是说：

$$\frac{\mathrm{d}P_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[P_i, H] = 0 \Rightarrow P_i(t) = P_i(0)$$

利用上面关于对易括号的结论还可以立刻得到：

$$\frac{\mathrm{d}X_i}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[X_i, H] = \frac{1}{i\hbar}\frac{1}{2m}\frac{\partial}{\partial P_i}\left(\sum_{j=1}^{3} P_j^2\right) = \frac{P_i}{m} = \frac{P_i(0)}{m}$$

因此我们得到了类似于匀速直线运动的结果：

$$X_i(t) = X_i(0) + \left(\frac{P_i(0)}{m}\right)t$$

在同一时间 t，不同方向上的位置算符是对易的：

$$[X_i(0), X_j(0)] = 0$$

但是，在不同时间 t，同一方向上的位置算符却是不对易的：

$$[X_i(t), X_i(0)] = \left[\frac{P_i(0)t}{m}, X_i(0)\right] = -\frac{i\hbar t}{m}$$

因此有不确定关系：

$$\langle(\Delta X_i)^2(t)\rangle\langle(\Delta X_i)^2(0)\rangle \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m}$$

因此，如果你已经测量了 $t=0$ 时粒子的位置，就不能再精确测量 t 时刻粒子的位置了。在波动力学（坐标表象）中，这意味着粒子的波包缓慢扩大。

如果现在粒子处于一个势场中，那么粒子的哈密顿量变成：

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$$

利用上面的结论，可以立刻得到：

$$\frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}[p_i,V(x)]=-\frac{\partial}{\partial x_i}V(x)$$

结合之前得到的关于 x 的方程，我们就有：

$$\frac{\mathrm{d}^2X_i}{\mathrm{d}t^2}=\frac{1}{i\hbar}\left[\frac{\mathrm{d}X_i}{\mathrm{d}t},H\right]=\frac{1}{m}\frac{\mathrm{d}P_i}{\mathrm{d}t}$$

于是，我们立刻得到了与经典力学类似的方程：

$$m\frac{\mathrm{d}^2X}{\mathrm{d}t^2}=-\nabla V(X)$$

对上式两侧取平均，我们就得到了位置算符均值随时间的演化：

$$m\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\langle X\rangle=-\langle\nabla V(X)\rangle$$

现在我们来看相当重要的一件事情！在之前，我们总是回避基底的演化，我们认为基底是不动的，但是其实并不是这样。考虑本征方程：

$$A|a'\rangle=a'|a'\rangle$$

在薛定谔绘景中，A 不变，因此基底 $|a\rangle'$ 自然保持不变。现在考虑海森堡绘景：

$$A^{(H)}(t)=\mathscr{U}^\dagger A(0)\mathscr{U}$$

那么本征值方程可以被写为：

$$A^{(H)}(\mathscr{U}^\dagger|a'\rangle)=a'(\mathscr{U}^\dagger|a'\rangle)\Rightarrow|a',t\rangle_H=\mathscr{U}^\dagger|a'\rangle$$

也就是说，海森堡绘景中的基底其实是向着薛定谔绘景中的态矢的相反方向旋转的。因此它们应该满足一个“反号”的薛定谔方程：

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|a',t\rangle_H=-H|a',t\rangle_H$$

基底的演化可以自然地给出算符的演化：

$$A^{(H)}(t)=\sum_{a'}\mathscr{U}^\dagger|a'\rangle a'\langle a'|\mathscr{U}=\mathscr{U}^\dagger A^{(s)}\mathscr{U}$$

此外，还可以注意到的一点是：无论在哪个绘景中，将态矢量在基底上展开的系数 $c_{a'}(t)$ 是一致的。这可以理解为我们在一个情况下旋转了态矢，而在另一个情况下旋转了基底，二者间的夹角是相同的。

假设系统初态在某个算符 A 的本征态上，我们想要研究：在经过时间 t 后，吸引处在算符 B 的本征态 $|b'\rangle$ 上的概率振幅是多大，这个值被称为转移振幅。在两种绘景下，转移振幅都是 $\langle b'|\mathscr{U}(t,0)|a'\rangle$。
最后，我们给出两种绘景的性质的比较：

Table 2.1 The Schrödinger Picture Versus the Heisenberg Picture

	Schrödinger picture	Heisenberg picture
State ket	Moving: (2.5), (2.27)	Stationary
Observable	Stationary	Moving: (2.84), (2.93)
Base ket	Stationary	Moving oppositely: (2.115), (2.116)