# 量子系统的时间演化

# 单选题 1分

设置

设系统哈密顿算符不显含时间，薛定谔方程的通解是$\psi(\vec{r},t)=\sum_n a_n\phi_n(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$，叠加系数$a_n$可以是时间t的函数吗？

A 不可以。

B 可以。

C 不确定。

提交

定态薛定谔方程:

$$\hat{H}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

把 $\hat{H}$ 的本征值集记为 $\{E_n\}$，本征函数集记为 $\{\phi_n(\vec{r})\}$

薛定谔方程的一般通解为:

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n a_n(t)\phi_n(\vec{r})$$

代入薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}\,\Psi(\vec{r},t) \quad ,\sum_n i\hbar\frac{da_n(t)}{dt}\phi_n(\vec{r}) = \sum_n a_n(t)\hat{H}\phi_n(\vec{r})$$

于是

$$\mathrm{i}\hbar\frac{da_n}{dt} = E_n a_n(t)$$

解为:
$$a_n(t) = a_n(0)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}$$

其中 $a_n(0)$ 应该由波函数的初始条件定出。若给定 $\Psi(\vec{r},t)$ 的初始值为

$$\Psi(\vec{r},0) = \Psi_0(\vec{r})$$

$$\Psi_0(\vec{r}) = \sum_n a_n \phi_n(\vec{r})$$

则
$$a_n(0) = a_n$$

$$\Psi(\vec{r},t) = \sum_n a_n\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\,\phi_n(\vec{r})$$

由于
$$\left|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\right|^2 = 1$$

所以 $$\left|a_n\,e^{-\mathrm{i}E_n t/\hbar}\right|^2 = |a_n|^2$$

即系统在任意时刻的能量几率分布都和初始时刻的能量几率分布相同

在H和时间无关的情况下，只要我们完全地解决了定态Schrödinger方程的问题，那么一旦知道了波函数的初始值，与时间有关的Schrödinger方程的解就可以很方便地得出。形式地说，这个解是

$$\Psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\,\Psi(\vec{r},0)$$

$$\Psi(\vec{r},0) \Rightarrow \boxed{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}} \Rightarrow \Psi(\vec{r},t)$$

时间演化算符

我们可以用时间演化算符作用在初始波函数上来得到此后任一时刻系统的波函数：

$$\psi(\vec{r},t)=\sum_n a_n(0)\psi_n(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$=\sum_n a_n(0)e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\psi_n(\vec{r})$$

$$=e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\sum_n a_n(0)\psi_n(\vec{r})$$

$$=e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\psi(\vec{r},0)$$

$\boxed{\hat{U}(t)=e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}}$ 就定义为不含时哈密顿系统的**时间演化算符**

例：一维自由粒子 $\delta(x)$ 波函数的时间演化（曾谨言1.3d）

$$\psi(x,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\psi(x,0)=e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\delta(x)\neq\delta(x)$$

例：一维自由粒子高斯波包的时间演化。t=0时刻波函数：

$$\psi(x,0)=e^{ik_0x}\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}$$

$$|\psi(x,0)|^2=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} \quad \Rightarrow \text{高斯函数}$$

所以，初始时刻波包宽度为σ。时间t之后，波函数演化为

$$\psi(x,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\psi(x,0)$$

$$=e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(k)e^{ikx}\,dk$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(k)e^{-\frac{i}{\hbar}t\hat{H}}e^{ikx}\,dk$$

$$\boxed{\varphi(k)=\left(\frac{2\sigma^2}{\pi}\right)^{1/4}e^{-\sigma^2(k-k_0)^2}}$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\varphi(k)e^{ikx-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}dk$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\left(\frac{2\sigma^2}{\pi}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\frac{\hbar t}{2m}k^2-\sigma^2(k-k_0)^2+ikx}dk$$

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ax^2+bx+c}dx=\sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{\frac{b^2}{4a}+c}}$$

$$=\left[\sqrt{2\pi}\sigma\left(1+\frac{i\hbar t}{2m\sigma^2}\right)\right]^{-\frac{1}{2}}e^{i\left(k_0x-\frac{\hbar k_0^2}{2m}t\right)-\frac{(x-\hbar k_0t/m)^2}{2\left(2\sigma^2+i\hbar t/m\right)}}$$

于是：

$$|\psi(x,t)|^2\propto e^{-\frac{(x-\hbar k_0t/m)^2}{2\left(\sigma^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\sigma^2}\right)}}$$

对照高斯分布表达式，可见时间t之后，波包中心运动速度为

$$\frac{x}{t}=\frac{\hbar k_0}{m}=\frac{p_0}{m}=v_0$$

波包宽度变为

$$\sigma(t)=\sqrt{\sigma^2+\frac{\hbar^2t^2}{4m^2\sigma^2}}$$

波包宽度随时间增大，即波包发散（曾谨言1.4）

## 力学量平均值随时间的变化

力学量平均值公式：

$$\overline{F}=\int\psi^*(x)\hat{F}\psi(x)\,dx$$

在推导过程中，并未要求ψ的展开系数与时间无关。实际上这个公式对任意时刻的波函数都适用：

$$\overline{F}=\int\psi^*(x,t)\hat{F}\psi(x,t)\,dx$$