Day 2. 量子系统随时间的演化

补充一段Sakurai上对于平移算符的讲解. 平移算符改变移动 x 的本征态: $\mathcal{T}(dx')|x'\rangle = |x'+dx'\rangle$.

考虑将它作用在任意态上. $|\alpha\rangle \to \mathcal{T}(dx')|\alpha\rangle = \mathcal{T}(dx')\int d^3x' |x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int d^3x' |x'+dx'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$

由于上面这个积分是遍及全空间的. 所以我们可以改写. $\int dx |x'+dx'\rangle\langle x|\alpha\rangle = \int dx |x'\rangle\langle x'-dx'|\alpha\rangle$.

它的性质: 1). 希望平移前后态的模保持. 故应幺正. $\mathcal{T}^\dagger(dx')\mathcal{T}(dx)=1$.

2). 平移可以"分段"进行: $\mathcal{T}(dx')\mathcal{T}(dx'') = \mathcal{T}(dx'+dx'')$.

3). 逆性质. $\mathcal{T}(dx') = \mathcal{T}(-dx')^{-1}$.

4). 单位性质: $\lim_{dx'\to 0}\mathcal{T}(dx') = 1$.

验证可知, 若取 $K=(\hat K_x, \hat K_y, \hat K_z)$, 且 $\hat K_x, \hat K_y, \hat K_z$ 都是厄米的. 则以下算符有以上所有性质: $\mathcal{T}(dx') = 1-i\vec{K}\cdot d\vec{x}'$.

那么, 可以导出平移算符和位置算符间的对易关系.

$$\begin{cases} \hat x\,\hat T(dx')|x'\rangle = x|x'+dx'\rangle = (x'+dx')|x'+dx'\rangle \\ T(dx')\,\hat x|x'\rangle = T(dx')\,x'|x'\rangle = x'|x'+dx'\rangle \end{cases} \Rightarrow [\hat x, \hat T(dx')]|x\rangle = dx'|x'+dx'\rangle \approx dx'|x'\rangle.$$

在经典力学中, 动量为无穷小平移的生成元. 上面的 K 可否认为是动量? 不行. 因为量纲不对. 故做如下调整 $K = \dfrac{p}{\text{constant with the dimension of Action}} \longrightarrow \hbar$.

从而 $T(dx') = 1 - i\cdot\frac{\hat p}{\hbar}\cdot dx$.

→ 量子系统的演化: 两种 picture.

考虑时间演化算符 $U(t,t_0)$. 它的作用为 $|\alpha,t_0;t\rangle = U(t,t_0)|\alpha,t_0\rangle$ 由概率流的守恒它应有性质. $U^\dagger(t,t_0)\,U(t,t_0)=1$

另外, 它应有性质: $U(t_2,t_0) = U(t_2,t_1)\,U(t_1,t_0)$. 与平移算符一样, 时间演化应写为 $U(t_0+t, t_0) = 1-i\Omega\,dt$. Ω 有频率量纲. 所以可以有下面的形式: $\Omega = \frac{H}{\hbar}$.

从无穷小时间演化的形式. $U(t_0+t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)\right]$ 可以导出 Schrodinger 方程. 即 $\frac{\partial}{\partial t}\hat U(t,t_0) = \hat H\hat U(t,t_0)$. 或 即 $\frac{\partial}{\partial t}|\alpha,t_0;t\rangle = H|\alpha,t_0;t\rangle$.

以上是 Schrodinger 绘景. 下面推 Heisenberg 绘景. 上面的空间平移和时间演化算符都是幺正变换. 下面统一用 $\hat U$ 记.

若对态做一个幺正变换 $|\alpha\rangle\to U|\alpha\rangle$ 则 $\langle\beta|\hat X|\alpha\rangle \to (\langle\beta|U^\dagger)\,\hat X\,(U|\alpha\rangle) = \langle\beta|U^\dagger\hat X U|\alpha\rangle$. 所以我们有两种方法看待幺正变换.

- 态矢从 $|\alpha\rangle\to\hat U|\alpha\rangle$. 而算符不变. - 算符从 $X\to U^\dagger X U$. 而态矢不变. 这两种看法对于可观测量的期望是等价

在第二个说法下. 我们可以定义所谓 Heisenberg Picture : let $\hat U(t,t_0=0) = \hat U(t) = \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)$. 从而 $A^{(H)} = U^\dagger(t)\,A^{S}\,U(t)$

从而有 Heisenberg Eq. $\dfrac{dA^{(H)}}{dt} = \dfrac{\partial U^\dagger}{\partial t}A^{(S)}U + U^\dagger A^{(S)}\dfrac{\partial U^\dagger}{\partial t}$ 使用 $\hat U(t)$ 的演化方程. $\dfrac{\partial\hat U}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat H\hat U$

$$= \frac{i}{\hbar}\hat U^\dagger\hat H\hat U\,\hat U^\dagger A^{(S)}U - \frac{i}{\hbar}U^\dagger A^{(S)}UU^\dagger HU$$

$$= \frac{1}{i\hbar}[A^{(H)}, U^\dagger HU] = \frac{1}{i\hbar}[A^{(H)}, H^{(H)}]$$

我们知道一个算符可以用它的本征矢展开：$A=\sum_{a'} a'|a'\rangle\langle a'|$. 随着算符演化，本征矢也演化. 将 $t=0$ 时本征矢记为 $|a'\rangle_H$，则有令 $|a',t\rangle_H = U^\dagger|a'\rangle_H$. 我们便有：

$$A^H(t) = \sum_{a'} a' \, |a',t\rangle_H \, \langle a',t|_H = \sum_{a'} a' \cdot U^\dagger |a'\rangle_H \, \langle a'|_H \cdot U = U^\dagger A^{(S)} \cdot U$$

我们可以观察态矢在算符本征矢上的展开系数.

$$\begin{cases} c_{a'}(t) = \langle a'| \, (\underbrace{U|\alpha, t_0=0\rangle}) & \rightarrow \text{在 Schrödinger 绘景、态矢演化.} \\ c_{a'}(t) = (\underbrace{\langle a'|U}) \, |\alpha, t_0=0\rangle & \rightarrow \text{Heisenberg 绘景. 算符的本征矢演化.} \end{cases}$$

所谓 transition amplitude. 设初态系统在 $t=0$ 时处于 A 的本征矢 $|a'\rangle$ 上，则在 t 时刻位于 B 的本征矢 $|b'\rangle$ 上的概率. 无论在何种绘景，都可以写作 $\langle b'|U|a'\rangle$.

→ 另一个看待演化的方式：path Integral.

Consider $|\alpha, t_0; t\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)\right] |\alpha, t_0\rangle$

$$= \sum_{a'} |a'\rangle\langle a'|\alpha, t_0\rangle \cdot \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_{a'}(t-t_0)\right).$$ ← 在一个与 $\hat{H}$ 对易的可观测量 $\hat{A}$ 的本征矢下面展开.

两侧同以 $\langle x''|$ 乘. 则 $\langle x''|\alpha, t_0; t\rangle = \sum_{a'} \langle x''|a'\rangle \langle a'|\alpha, t_0\rangle \cdot \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_{a'}(t-t_0)\right]$.

向其中插入完备性关系. $\underbrace{\langle x''|\alpha, t_0; t\rangle}_{\psi(x'',t)} = \int \sum_{a'} \langle x''|a'\rangle \langle a'|x'\rangle \underbrace{\langle x'|\alpha, t_0\rangle}_{\psi(x',t_0)} \cdot \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \cdot E_{a'}(t-t_0)\right] \cdot dx'$

它实际将 x' 处波函数传播到 x'' 处. 称为「传播子」.

从而 $\psi(x'',t) = \int d^3x' \cdot \underbrace{K(x'',t;x',t_0)} \cdot \psi(x',t_0) \cdot dx$.　　$K(x'',t;x',t_0) = \sum_{a'} \langle x''|a'\rangle \langle a'|x'\rangle \cdot \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_{a'}(t-t_0)\right]$.

显然，如果固定 t, x 那么容易验证 $K(x'',t;x',t_0)$ 这个东西演化符合 Schrödinger Eq.　并且 $K(x'',t_0;x',t_0) = \delta(x''-x')$.

由于 $\sum_{a'} |a'\rangle \cdot \exp\left[-\frac{i}{\hbar} E_{a'}(t-t_0)\right] \langle a'| = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)\right)$. 从而 propagator 可以写成 $K(x'',t;x',t_0) = \langle x''| \exp\left(-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)\right) |x'\rangle$.

它还是初态位于 $|x'\rangle$ 的粒子在 t 时刻位于 $|x''\rangle$ 态的概率振幅

还有一种理解是. $K(x'',t;x',t_0) = \langle x''|U|x'\rangle = \underline{\langle x'',t|x',t_0\rangle}$　所以就是 Heisenberg 绘景下 t, t_0 两个时间点上的两个本征矢的内积. 或是所谓转换函数

考虑在传播子中插一个完备性关系. $\langle x''',t'''|x',t'\rangle = \int d^3x \, \langle x''',t'''|\underline{x'',t''\rangle \, \langle x'',t''}|x',t'\rangle \cdot dx''$.　这样的操作可无限进行下去.

↓ 有点类似计算一个 Markov 过程的转移概率.

考虑从 $|x_1,t_1\rangle$ 到 $|x_N,t_N\rangle$ 的 transition Amp.　时间被划分为等长的 $N-1$ 段. 有 $t_j - t_{j-1} = \Delta t$. 从而有：

$$\langle x_N,t_N|x_1,t_1\rangle = \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \cdots \int dx_2 \, \langle x_N,t_N|x_{N-1},t_{N-1}\rangle \langle x_{N-1},t_{N-1}|x_{N-2},t_{N-2}\rangle \cdots \langle x_2,t_2|x_1,t_1\rangle.$$

在这个积分中，所有路径都以对应的振幅有贡献的，而在经典力学中，只有作用量最小的唯一一路径是可能的. 如何使 $\hbar \to 0$ 时，还原经典力学？

Feynman 猜：$\exp\left(i\int_{t_1}^{t_2} \frac{L_{cl}(x,\dot{x})}{\hbar} dt\right)$ "corresponding to" $\langle x_2,t_2|x_1,t_1\rangle$

记. $S(n,n-1)=\int_{t_{n-1}}^{t_n}dt\cdot\mathcal{L}_{classical}(x,\dot{x})$. 把所有小段的跃迁振幅都乘起来. $\prod_{n=2}^{N}\exp\left(\frac{i}{\hbar}S(n,n-1)\right)=\exp\left(\frac{i}{\hbar}S(N,1)\right)$. 这可称为一条路径的贡献

我们添加一个归一化常数. 写成 $\langle x_n,t_n|x_{n-1},t_{n-1}\rangle=\frac{1}{w(\Delta t)}\cdot\exp\left(\frac{i}{\hbar}S(n,n-1)\right)$. 并对每一小段上的作用量用匀直近似. 从而有 $\langle x_n,t_n|x_{n-1},t_{n-1}\rangle=\frac{1}{w(\Delta t)}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\cdot m\cdot\frac{(x_n-x_{n-1})^2}{2\,dt}\right)$

若取 $\frac{1}{w(\Delta t)}=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\,\Delta t}}$ 才有 $\langle x_n,t_n|x_{n-1},t_{n-1}\rangle\xrightarrow{t_n\to t_{n-1}}\delta(\cdot)$.

所以我们有 $\langle x_N,t_N|x_1,t_1\rangle=\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{N-1}{2}}\int dx_{N-1}\cdots\int dx_2\prod_{n=2}^{N}\exp\left[\frac{iS(n,n-1)}{\hbar}\right]$, let $\int_{x_1}^{x_N}\mathcal{D}[x(t)]=\lim_{N\to+\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{N-1}{2}}\int dx_{N-1}\cdots\int dx_2$.

then. $\langle x_N,t_N|x_1,t_1\rangle=\int_{x_1}^{x_N}\mathcal{D}[x(t)]\,\exp\left(i\int_{t_1}^{t_N}\frac{\mathcal{L}_{cl}(x,\dot{x})}{\hbar}dt\right)$

下面证明 Feynmann Path Int. 与 Schrodingen Eq. 等价. (主要证明方法是展开"最后一截").

$$\langle x_N,t_N|x_1,t_1\rangle=\int dx_{N-1}\langle x_N,t_N|x_{N-1},t_{N-1}\rangle\langle x_{N-1},t_{N-1}|x_1,t_1\rangle\cdot dx_{N-1}$$
$$=\int dx_{N-1}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\cdot\exp\left[\left(\frac{im}{2\hbar}\right)\frac{(x_N-x_{N-1})^2}{\Delta t}-i\frac{V\Delta t}{\hbar}\right]\cdot\langle x_{N-1},t_{N-1}|x_1,t_1\rangle.$$

或者记 $\xi=x_N-x_{N-1}$. $\langle x,t+\Delta t|x_1,t_1\rangle=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi\cdot\exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}-\frac{iV\Delta t}{\hbar}\right)\langle x-\xi,t|x_t,x_1\rangle$

直接考虑 $\Delta t\to0$ 的情形. 此时只有 $\xi\to0$ 附近才对上面积分有贡献. 所以将 $\langle x-\xi,t|x_1,t_1\rangle$ 在 $\xi=0$ 附近. 以及在 $\Delta t=0$ 附近展开 $\langle x,t+\Delta t|x_1,t_1\rangle$. 和 $\exp\left(-\frac{iV\Delta t}{\hbar}\right)$. 在 $\Delta t=0$ 展开.

$$\langle x,t|x_1,t_1\rangle+\Delta t\cdot\frac{\partial}{\partial t}\langle x,t|x_1,t_1\rangle=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi\cdot\exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right)\cdot\left(1-\frac{i}{\hbar}V\Delta t\right)\left(\langle x,t|x_1,t_1\rangle+\left(\frac{\xi^2}{2}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\langle x,t|x_1,t_1\rangle\right)$$

上面有两个一阶小. 注意到 $\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right)\cdot d\xi=1$. $\int_{-\infty}^{+\infty}d\xi\,\xi^2\exp\left(\frac{im\xi^2}{2\hbar\Delta t}\right)=\sqrt{2\pi}\left(\frac{i\hbar\Delta t}{m}\right)^{3/2}$. 上面的式子写为:

$$\Delta t\cdot\frac{\partial}{\partial t}\langle x,t|x_1,t_1\rangle=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}}\sqrt{2\pi}\left(\frac{i\hbar\Delta t}{m}\right)^{3/2}\cdot\frac{1}{2}\cdot\frac{\partial^2}{\partial x^2}\langle x,t|x_1,t_1\rangle-\left(\frac{i}{\hbar}\right)\Delta t\cdot V(x)\langle x,t|x_1,t_1\rangle$$
直接看出传播子满足schrodinger方程.

一 与H对易的力学量.

特别地. 我们在这里考虑可观测量A. 使得 $[A,H]=0$. $H|a'\rangle=E_{a'}|a'\rangle$. 你还可以用$\{|a'\rangle\}$来展开时间演化: $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}H t\right)=\sum_{a'}|a'\rangle\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{a'}t\right)\langle a'|$.

如果把初态矢 $|\alpha\rangle$ 在 $\hat{A}$ 的本征矢上展开, 则初值问题的求解将变得异常简单. 考虑 $|\alpha,t=0\rangle=\sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle=\sum_{a'}C_{a'}|a'\rangle$

将时间演化直接作用在上面有: $|\alpha,t_0=0;t\rangle=\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)\cdot|\alpha,t_0=0\rangle=\sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle\cdot\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{a'}t\right)$.

换言之. 你可以认为只有展开系数在变化: $C_{a'}(t=0)\to C_{a'}(t)=C_{a'}(t=0)\cdot\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{a'}t\right)$.

在最简单, 最特殊情形下. $|\alpha\rangle$ 就是 $\hat{A}$ 的本征矢. $|\alpha\rangle=|a'\rangle$. 有 $|a',t\rangle=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{a'}t\right)\cdot|a'\rangle$. 从而. 若系统初始处于某个与H对易的算子的本征矢上, 则以后一直在.

→ 力学量的期望演化.

现在考虑与H并不对易的力学量B. 下面计算期望. 设系统初始态位于与H对易的力学量A的本征态上.

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

这是两个数，可以合并.

因此，只要系统初态处在某个与H对易的算符本征态上，它的任何可观测量期望都不演化.

若初态是A的各个本征态叠加呢？我们有：

$$\langle B\rangle = \left[\sum_{a'} c_{a'}^* \langle a'|\exp\left(\frac{iE_{a'}t}{\hbar}\right)\right] B \left[\sum_{a''} c_{a''}\exp\left(-\frac{iE_{a''}t}{\hbar}\right)|a''\rangle\right]$$

$$= \sum_{a'}\sum_{a''} c_{a'}^* c_{a''}\cdot\exp\left(\frac{i(E_{a'}-E_{a''})t}{\hbar}\right)\langle a'|B|a''\rangle$$

可以看出，这个期望是振荡的，且频率或角频率和Bohr光谱测出来的一样：$\omega_{a''a'} = \frac{E_{a''}-E_{a'}}{\hbar}$,

→ 下面给一个例子：自旋进动. 设系统有沿+z方向的磁场，则系统的Hamiltonian写为：$H = -\left(\frac{e}{m_ec}\right)\vec{S}\cdot\vec{B} = -\left(\frac{eB}{m_ec}\right)\cdot S_z$ 所以S_z和H是对易的

S_z的本征值为$\pm\frac{1}{2}$ (1/2自旋系统). 故$E_\pm = \mp\frac{e\hbar B}{2m_ec}$. let $H = \omega\cdot S_z$. 设系统的初态位于$|\alpha\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle$.

容易给出：$|\alpha, t_0=0; t\rangle = c_+\exp\left(-\frac{1}{2}i\omega t\right)|+\rangle + c_-\exp\left(\frac{1}{2}i\omega t\right)|-\rangle$.

根据刚才的讨论，如果初始时候自旋是纯的$|+\rangle$或$|-\rangle$，则它一直会保持在这个态上，只有波函数的相位会变.

若系统初态位于S_x的$|+\rangle$，也就是$c_+ = c_- = \frac{1}{\sqrt{2}}$. 那么我们有：

$$\|\langle S_x\pm|\alpha, t_0=0, t\rangle\|^2 = \left\|\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{1}{2}i\omega t\right) \pm \frac{1}{2}\exp\left(\frac{1}{2}i\omega t\right)\right\|^2 = \begin{cases}\cos^2\frac{\omega t}{2}, & (+)\\ \sin^2\frac{\omega t}{2} & (-)\end{cases}$$

像经典力学中z方向的力矩可以引起x方向角速度变化一样，我们将这个行为称为「自旋进动」.

→ T-E不确定关系.

我们现在要确定一个态$|\alpha\rangle$在演化了时间t后得到的态$U(t)|\alpha\rangle$与$|\alpha\rangle$有多么大的相关性. 谈到"相关性"则必有内积. 我们考虑.

$$c(t) = \langle\alpha|\alpha; t_0=0, t\rangle = \langle\alpha|\hat{U}(t,0)|\alpha\rangle$$

$$= \left(\sum_{a'} c_{a'}^*\langle a'|\right)\left(\sum_{a''} c_{a''}\exp\left(-\frac{iE_{a''}t}{\hbar}\right)|a''\rangle\right) = \sum_{a'}\|c_{a'}\|^2\cdot\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E_{a'}t\right)$$ ("相关振幅")

若我们假设本征矢足够密集，以至于求和可以用积分近似，则我们可将上面的相关振幅重写为：

$c(t) = \int dE\,\|g(E)\|^2\cdot\rho(E)\cdot\exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$. 由于我们将$\sum_{a'}\|c_{a'}\|^2$换成了$\int dE\,\rho(E)\cdot\|g(E)\|^2$，所以我们要求换完了以后还得再归一.

考虑在实际物理情景中的近似，能级的密度可能在某个E_0附近的ΔE宽度内比较密集，从而上式改写为：

$c(t) = \exp\left(-\frac{iE_0t}{\hbar}\right)\int dE\, g^2(E)\,\rho(E)\cdot\exp\left(-\frac{i}{\hbar}(E-E_0)\cdot t\right)$. 其中的物理意义在于：在t很大时，随着E变化，$\exp\left[-\frac{it}{\hbar}(E-E_0)\right]$剧烈振荡，从而导致积分值近乎为0

这被称为"互相抵消"的临界状态/特征时间大约为$\Delta t\sim\frac{\hbar}{\Delta E}$. 这是所谓t-E不确定关系. $\Delta t\Delta E\sim\hbar$. 也就是说，这里的$\Delta t$是历经$\Delta t$演化的态与初态间相关性消失的临界时间

下面我们继续讨论 Heisenberg 绘景的相关内容。之前已导出 Heisenberg 绘景的算符演化方程. $\frac{dA^{(H)}}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}[A^{(H)}, U^\dagger H U]$ 由U与H的对易性. $\frac{dA^{(H)}}{dt} = -\frac{1}{i\hbar}[A^{(H)}, H]$.

这里补充两个对易子的计算式: $[x_i, F(p)] = i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_i}$, 推导如下:

不妨设F(p)可展开为级数形式. $F(p) = \sum_i a_i \hat p^i$ 先证明一个结论: $[x_i, \hat p^n] = i\hbar n \hat p^{n-1}$ 使用数归. 首先 $[x_i, \hat p] = i\hbar$ 成立. 进而归纳:

(若前面成立). $[\hat x_i, \hat p^n \hat p] = [\hat x_i, \hat p^n]\hat p + \hat p^n[\hat x_i, \hat p] = i\hbar n \hat p^{n-1}\hat p + \hat p^n i\hbar = i\hbar(n+1)\hat p^n$. 从而归纳证明成立.

从而 $[x_i, F(p)] = \sum[x_i, a_n\hat p^n] = \sum_n a_n[x_i, \hat p^n] = \sum_n i\hbar n a_n \hat p^{n-1} = i\hbar\frac{\partial F}{\partial p_i}$ 同理可证. $[p_i, G(x)] = -i\hbar\frac{\partial G}{\partial x_i}$

下面对单粒子进行正则量子化. $H = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$ 由Heisenberg方程计算各算符演化:

$$\begin{cases} \frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p_i, H] = 0 \\ \frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[x_i, H] = \frac{1}{i\hbar}\cdot\frac{1}{2m}i\hbar\cdot\frac{\partial}{\partial p_i}\left(\sum_{j=1}^{3} p_j^2\right) = \frac{p_i}{m} = \frac{p_i(0)}{m} \end{cases}$$

从而有运动方程.

$$\begin{cases} p_i(t) = p_i(0) \\ x_i(t) = x_i(0) + \left(\frac{p_i(0)}{m}\right)t \end{cases}$$

考虑不同时刻下 x_i 之间的对易关系. $[x_i(t), x_i(0)] = [x_i(0) + \frac{p_i(0)}{m}t, x_i(0)] = [\frac{p_i(0)}{m}t, x_i(0)] = -i\hbar\frac{t}{m}$.

由 $\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle \geq \frac{1}{4}|\langle[A,B]\rangle|^2$, 这告诉我们位置算符的不确定度, 可以期望得到 从而 $\langle(\Delta x_i)^2\rangle\langle(\Delta x_i)^2\rangle \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}$.

位置的不确定性越来越大. 现在我们考虑加一个势能. $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$.

$$\begin{cases} \frac{dp_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p_i, V(x)] = -\frac{\partial}{\partial x_i}V(x) \\ \frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[x_i, \frac{p^2}{2m}] = \frac{p_i}{m} \end{cases}$$

可以将 $\frac{dx_i}{dt}$ 看作算符. 再用一次Heisenberg方程: $\frac{d}{dt}\left(\frac{dx_i}{dt}\right) = \frac{1}{i\hbar}[\frac{dx_i}{dt}, H] = \frac{1}{i\hbar}[\frac{p_i}{m}, H] \overset{H.Eq.}{=} \frac{1}{m}\frac{dp_i}{dt}$.

从而得到二阶导: $m\frac{d^2x_i}{dt^2} = -\nabla V(x)$. 两侧对 Heisenberg 表示求期望. $m\frac{d^2}{dt^2}\langle x\rangle = \frac{d}{dt}\langle p\rangle = -\langle\nabla V(x)\rangle$. 这和牛顿力学经典形式相符, 称为 Ehrenfest 定理.

下面考虑 Heisenberg 绘景下本征矢的演化. 由 $A^{H}(t) = U^\dagger A(0) U$. 令它的本征方程为: $U^\dagger A(0) U U^\dagger|a'\rangle = a' U^\dagger|a'\rangle$. $\Rightarrow |a', t\rangle_H = U^\dagger|a'\rangle$ $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|a', t\rangle_H = -H|a', t\rangle_H$

所以我们看一个态在本征矢上

$$\begin{cases} c_{a'}(t) = \langle a'|\,(U|\alpha, t=0\rangle) & \text{Schrodinger} \\ c_{a'}(t) = (\langle a'|U)\,|\alpha\rangle & \text{Heisenberg} \end{cases}$$

下面谐振子量子化. $\hat H = \frac{1}{2m}\hat p^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat x^2$. 我们要求出对应的所有本征矢. 为此, 我们先构造所谓升降算符和粒子数算符. 用 $\hat x$, $\hat p$ 进行线性组合有:

$\hat a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat x + \frac{i\hat p}{m\omega}\right)$. $a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat x - \frac{i\hat p}{m\omega}\right)$. 计算它们的对易关系: $[a, a^\dagger] = \left(\frac{1}{2\hbar}\right)\left(-i[\hat x, \hat p] + i[\hat p, \hat x]\right) = 1$. 显然 a, $a^\dagger$ 不是厄米的. 利用它们我们可构造厄米算符

$N = a^\dagger a = \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)\left(\hat x^2 + \frac{1}{m^2\omega^2}\hat p^2\right) + \left(\frac{i}{2\hbar}\right)[\hat x, \hat p] = \frac{H}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$ 或 $H = \hbar\omega(N + \frac{1}{2})$. 以 $|n\rangle$ 记N本征态. 则计算对易关系有:

$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger[a, a] + [a^\dagger, a]a = -a$, $[N, a^\dagger] = a^\dagger$

从而将升降算符作用于N的本征矢上:

$$\begin{cases} Na^\dagger|n\rangle = ([N, a^\dagger] + a^\dagger N)|n\rangle = a^\dagger|n\rangle + a^\dagger N|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle \\ Na|n\rangle = ([N, a] + aN)|n\rangle = -a|n\rangle + na|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \end{cases}$$

这意味着 $a^\dagger|n\rangle$ 和 $a|n\rangle$ 实际上都是N的本征矢. 只不过 $a^\dagger|n\rangle$ 对应本征值 $(n+1)$. 而 $a|n\rangle$ 对应于本征值 $n-1$.