高等量子力学

陈 啟 洲

中 山 大 学

一九八二年二月·广州

082817

高等量子力学

目录

参考书：《统计物理学中的场论方法》

高等量子力学目录

高等量子力学

第一章 预备知识

§1. 线性空间；右矢量和左矢量

§1.1 线性空间

设无穷多个元素 $a, b, c, d, \cdots$ 的集合 $R \equiv \{a, b, c, d \cdots\}$ 如果满足下列条件时，就叫做度规（metric）线性空间或简称线性空间。

1. 定义用复数 $\{\lambda_1, \cdots \lambda_2 \cdots\}$ 乘 R 族中的元素；且满足下列公理：(1) $\lambda a = b \in R$（封闭性）；(2) $(\lambda_1 + \lambda_2) a = \lambda_1 a + \lambda_2 a$；(3) $\lambda_1 \lambda_2 a = \lambda_1(\lambda_2 a)$；(4) $1a = a$，(5) $0a = 0$ 其中 $0, 1, \lambda_1, \lambda_2, \cdots$ 是某一域中的复数.

2. 定义 R 族中元素之和：(6) $a + b = c \in R$（封闭性）；(7) $a + b = b + a$（交换性）；(8) $\lambda(a+b) = \lambda a + \lambda b$（数乘的封闭性）；(9) $a + (b+c) = (a+b) + c$（结合性）；(10) $a + b = 0$，当且仅当 $a = -b$（零元素的唯一性）.

3. 定义元素的标量积（或称内积）：(11) $(a, b) = \lambda$ 即元素的内积是一个复数量；(12) $(a, b) = (b, a)^*$，其中 $*$ 表示复数共轭. (13) $(a, b+c) = (a, b) + (a, c)$（内积的分配性）；(14) $(a, \lambda b) = \lambda(a, b)$.

利用 (12)—(14) 式可以证明：$(a+b, c) = (a, c) + (b, c)$ 以及 $(\lambda a, b) = \lambda^*(a, b$ [illegible]

顺便指出：如果 R 族中 [illegible]，即 (1)—(10) 式，则这些元素构成的空间叫做线性 [illegible] 有时也简称线性空间.

度量线性空间（以后简称线性空间）中元素叫做矢量. 矢量的内积称为模，用 $|a|^2 \equiv (a, a)$ 表示，它是一个实数，如果 R 的任何元素的模 $|a|^2 \geq 0$（当 $a = 0$ 时才取等号），则认为该空间具有正规量的. 反之则认为负规量空间. 以后我们只讨论 $|a|^2 \geq 0$ 的情况. 模的正平方根称为矢量 a 的长度 $\|a\|$:

$\|a\|=\sqrt{|a|^2}=\sqrt{(a,a)}$ 在许多参考书中常常把矢量的长度 $\|a\|$ 叫做模，这时矢量的内积等于模的平方．如果 $(a,a)=1$ 则称矢量 a 归一化为一．如果 $a\neq 0$，$b\neq 0$，但 $(a,b)=0$ 则称 a 和 b 是正交的．

设线性空间 R 有 m 个元素 e_i（$i=1,2,\cdots m$），且有复数数 λ_i，若等式 $\sum_{i=1}^{m}\lambda_i e_i=0$ 仅在 $\lambda_1=\lambda_2\cdots=\lambda_m=0$ 时才成立，则矢量 $e_1,e_2,\cdots e_m$ 叫做线性无关的［例如：若 R 是三维空间内的全体矢量的集合，则在 R 内可以确定三个线性无关的矢量，第四个矢量是它们的线性组合］．如果在线性空间中线性无关的矢量的最大数目为 n 个，则数目 n 称为空间的维数．若在 R 中有无穷多个线性无关矢量时，则 R 的维数是无穷的．在 n 维线性空间 R_n 中，n 个线性无关矢量的最大集合叫做完全集．通常存在许多（甚至无限多个）这样的集合，在非负模空间中对于一个给定的线性无关完全集，可以将集中的元素进行线性变换而得到另一个线性无关的完全集．一个完全集中的全部元素是正交的．若

$$(e_i,e_k)=\delta_{ik}\qquad i,k=1,2,\cdots n \tag{1.1}$$

则把这个正交归一集叫做 n 维线性空间 R_n 的基矢量的一种集．在 R_n 空间中的任意矢量 a，均可按照基矢量的某种完全集展开：

$$a=\sum_{i=1}^{n}\alpha^i e_i \tag{1.2}$$

其中系数

$$\alpha^i=(e_i,a) \tag{1.3}$$

§1.2 右矢量（ket）和左矢量（bra）

设有一个抽象的线性空间，在这个空间中的矢量用右矢量（ket）表示记作 $|\rangle$．如果我们希望表示某一特定的元素 A，则在三角号内填入一定的标记，如 $|A\rangle$，$|A,B\cdots k\rangle$ 等等．设有任意复数 λ 和任意右矢 $|A\rangle$，我们定义数乘：

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

$$
\left.\begin{array}{l}
\lambda|A\rangle=|B\rangle\text{，其中 }|B\rangle\text{ 也是一个右矢，}\\
(\lambda_1+\lambda_2)|A\rangle=\lambda_1|A\rangle+\lambda_2|A\rangle,\\
\lambda_1\lambda_2|A\rangle=\lambda_1(\lambda_2|A\rangle)\\
1|A\rangle=|A\rangle,\quad 0|A\rangle=|0\rangle\text{，即零右矢}
\end{array}\right\}\quad(1.4)
$$

再定义右矢之和：

$$
\left.\begin{array}{l}
|A\rangle+|B\rangle=|C\rangle\quad |C\rangle\text{ 也是右矢}\\
|A\rangle+|B\rangle=|B\rangle+|A\rangle,\\
\lambda(|A\rangle+|B\rangle)=\lambda|A\rangle+\lambda|B\rangle\\
|A\rangle+(|B\rangle+|C\rangle)=(|A\rangle+|B\rangle)+|C\rangle\\
|A\rangle+|B\rangle=|0\rangle\quad\text{仅当 }|B\rangle=-|A\rangle
\end{array}\right\}\quad(1.5)
$$

其次将每个右矢与一个新的"实体"联系起来，这种"实体"叫做左矢量（bra），表示为 $\langle|$，对于特定的 A "实体"表示为 $\langle A|$ 或 $\langle A$，… B，$A|$ 等等。右矢 $|A\rangle$ 和左矢 $\langle A|$ 存在如下对应关系：

$$
\left.\begin{array}{l}
|A\rangle\longleftrightarrow\langle A|\\
\lambda|A\rangle\longleftrightarrow\lambda^*\langle A|\\
|A\rangle+|B\rangle\longleftrightarrow\langle A|+\langle B|
\end{array}\right\}\quad(1.6)
$$

由这些对应关系，可以看到左矢 $\langle A|$，$\langle B|$ …，满足公理（1.4）和（1.5）式，如果我们把右矢的全体看成一个"空间"时，则由对应的左矢量的全体构成另一个"空间"，称后者是前者的对偶（dual）"空间"。将左矢和右矢"拼拢"构成一个复数 $\langle A|B\rangle$，且定义：

$$
\left.\begin{array}{l}
\langle A|B\rangle=\langle B|A\rangle^*\\
\langle B|(|A\rangle+|A'\rangle)=\langle B|A\rangle+\langle B|A'\rangle\\
\langle B|(\lambda|A\rangle)=\lambda\langle B|A\rangle
\end{array}\right\}\quad(1.7)
$$

应该注意，左、右矢量是属于不同空间的矢量，这样两种矢量相加是没有意义的，但可以相乘，即：如果用右矢（左矢）左（右）乘右（右）的结果 $\langle A|B\rangle$ 称为右（左）矢的内积，若用左（右）矢右（左）乘右（左）矢，所得结果写作 $|A\rangle\langle B|$ 是一个线性

算符：因为当 $|A\rangle\langle B|$ 左乘右矢 $|C\rangle$ 时得到一个新右矢量 $|A\rangle\langle B|C\rangle$，或者，记它右乘一个左矢 $\langle D|$ 得到一个新的左矢 $\langle D|A\rangle\langle B|$. 另外，算符 $|A\rangle\langle B|$ 的厄米共轭（用十字表示）算符是 $|B\rangle\langle A|=\{|A\rangle\langle B|\}^+$.

对于任何一套正交归一的完备组 $\{|A\rangle\}$ $\sum_A |A\rangle\langle A|$ 是一个单位算符，即：

$$\sum_A |A\rangle\langle A| = 1 \tag{1.8}$$

§2 状态空间，状态和力学量的表示.

在量子力学中一个体系的状态（即粒子的统计分布）用波函数描写．而波函数的形式与表象有关，例如在 x 表象中的波函数是 $\psi_A(x)$，它的模 $|\psi|^2$ 预言在 A 状态下粒子的分布几率，根据态的叠加原理可将 $\psi_A(x)$ 展开　按M的本征函数展开.

$$\psi_A(x)=\sum_i C_{M_i}\psi_{M_i}(x)$$

其中 C_{M_i} 是 M_i 的函数，$|C_{M_i}|^2$ 预言在同一状态 A 下粒子按力学量 M 的分布几率，所以把 C_{M_i} 看作 M 表象中的波函数．为了探讨体系（与表象无关）的普遍规律，Dirac 引入抽象的线性空间，认为体系的状态 A 可用该空间的右矢量 $|A\rangle$ 描写，每个状态都有一个相应的函数 $\psi_A(M)\equiv\langle M|A\rangle$（它是 M 表象中的波函数）．即

$$|A\rangle\longleftrightarrow\psi_A(M) \tag{1.9}$$

一个体系的全部可能状态的总体：$|A_1\rangle$，$|A_2\rangle$，…，构成一个线性空间．因为：(1) 根据态的叠加原理，如果 $|A_1\rangle$ 及 $|A_2\rangle$ 都属于这个总体，则它们的线性组合也属于这个总体，即：

$$|A\rangle\longleftrightarrow\psi_A(M)\quad .\quad |B\rangle\longleftrightarrow\psi_B(M)$$

则
$$a|A\rangle+b|B\rangle\longleftrightarrow a\psi_A(M)+b\psi_B(M) \tag{1.10}$$

其中 a, b 为任意复常数．(2) 根据波函数的统计解释，$a\psi_A(M)$

和 $\psi_A(M)$ 代表物理上相同的状态 $|A\rangle$，即 $|A\rangle \longleftrightarrow \psi_A(M)$，$a|A\rangle \longleftrightarrow a\psi_A(M)$，所以 $|A\rangle$ 满足线性空间的数求公理 (1)—(5)．同样地，$|\psi_A(M)|^2$ 代表在态 A 找到力学量 M 的分布几率（它显然是一个数量），即

$$|\psi_A|^2 = \sum_M \langle A|M\rangle\langle M|A\rangle = \langle A|A\rangle.$$

同理可得

$$\langle A|B\rangle = \langle B|A\rangle^*.$$

可见状态矢量 $|A\rangle$，$|B\rangle$ 满足内积定义．顺便指出：

$$\psi_A^*(x) \longleftrightarrow \langle A|.$$

综上所述一切可能状态的总体 $|A_1\rangle, |A_2\rangle, |A_3\rangle \cdots$ 构成一个线性空间，我们叫它做状态空间，物理上的每一个状态都成为这个空间中的一个矢量（即态矢量）用右矢 $|\ \rangle$ 表示．一个真实的物理体系的态空间的维数是无穷的．在无穷空间中所有属于连续谱的状态矢量的长度 $\sqrt{\langle A|A\rangle}$ 都是无穷大的，因此要按照特别的方式进行"归一化"通常采用 δ-函数进行"归一化"，即

$$\langle A|B\rangle = \delta(A,B) \equiv \begin{cases} \delta(A-B) & \text{对于连续谱} \\ \delta_{AB} & \text{对于间断谱} \end{cases} \quad \cdots(1.11)$$

当我们用态空间的矢量代表状态时，必须用这个空间的线性变去代表力学量，例如在 X 表象中的某一力学量 $L(X, P_x)$，设 $\psi_A(x) \equiv \langle x|A\rangle$ 及 $\psi_B(x) \equiv \langle x|B\rangle$ 分别代表两个态的波函数，它们满足

$$L(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi_A(x) = \psi_B(x),$$

那么由态矢和波函数的对应关系：

$$|A\rangle \longleftrightarrow \psi_A(x), \quad |B\rangle \longleftrightarrow \psi_B(x),$$

而且 $\psi_B(x)$ 是 $\psi_A(x)$ 的线性函数，因而 $|B\rangle$ 也应是 $|A\rangle$ 的线性函数，这种函数关系可写成 $\pi|A\rangle = |B\rangle$，其中 π 是态空间上的一个线性变换，它与力学量算符 $L(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})$ 存

在如下对应关系：

$$\pi|A\rangle \longleftrightarrow L(x, -\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi_A(x) \quad \cdots(1.12)$$

如果 $\psi_A(x)$ 是算符 $L(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x})$ 的本征波函数，则 $|A\rangle$ 也是 π 的本征矢量，属于同样的本征值．在态空间中力学量 $L(x, P_x)$ 的本征方程将写为：

$$\pi|L'\rangle = L'|L'\rangle \quad \cdots(1.13)$$

即 $|L'\rangle$ 是 π 的本征态属于本征值为 L'．

由左、右矢量的对应关系（1.6）式，矢态的线性变换也有如下关系：

设在右矢量空间中的线性变换 π 满足：$\pi|A\rangle = |B\rangle$，则在左矢量空间中存在相应变换 π^+ 使得：$\langle B| = \langle A|\pi^+$．即：

$$|A\rangle \longleftrightarrow \langle A|,\quad |B\rangle \longleftrightarrow \langle B|,\quad \pi|A\rangle \longleftrightarrow \langle A|\pi^+ \quad \cdots(1.14)$$

利用（1.14）式容易证明：

$$\langle A|\pi|B\rangle = \langle B|\pi^+|A\rangle^* \quad \cdots(1.15)$$

在态空间中我们总可以选择一套线性无关且正交归一完备的矢量作为基矢量 $\{|\alpha\rangle\}$，每一个态矢量 $|A\rangle$ 都可以表示成基矢的线性组合，组合系数就可用来表示这个矢量，即将这些系数排成单列矩阵（$\langle A|$ 在相应基 $\{\langle\alpha|\}$ 中的系数排成单行矩阵），而每个线性变换用一个矩阵表示．当态矢作线性变换 $|A\rangle \longrightarrow \pi|A\rangle$ 时，将可表示为相应矩阵相乘，任何一种把态矢和线性变换表示成矩阵的方法叫做一种表象，上面选择的正交归一完备组 $\{|\alpha\rangle\}$ 作为建立表象的基矢量，这种表象称为正交的 α 表象．

上面的叙述可用数学表示式表达如下：

$$|A\rangle = \sum_\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha|A\rangle \quad \cdots(1.16)$$

其中 $\langle\alpha|A\rangle$ 是状态 A 在 α 表象中的波函数

$$\langle\alpha'|\alpha\rangle=\delta(\alpha,\alpha')=\begin{cases}\delta(\alpha-\alpha') & \text{连续谱}\\ \delta_{\alpha\alpha'} & \text{间断谱}\end{cases} \quad \cdots(1.17)$$

$$\langle\beta|A\rangle=\sum_{\alpha}\langle\beta|\alpha\rangle\langle\alpha|A\rangle \quad \cdots(1.18)$$

因为$\langle\beta|A\rangle$是β表象中状态A的波函数，$\langle\alpha|A\rangle$是α表象中状态A的波函数，所以(1.18)式是状态A的波函数从α表象到β表象的变换公式，不难得到线性变换Π的矩阵从α表象到β表象的变换公式：

$$\langle\beta|\Pi|\beta'\rangle=\sum_{\alpha,\alpha'}\langle\beta|\alpha\rangle\langle\alpha|\Pi|\alpha'\rangle\langle\alpha'|\beta'\rangle \quad \cdots(1.19)$$

其中$\langle\beta|\Pi|\beta'\rangle$是$\beta$表象中$\Pi$的矩阵元，$\langle\alpha|\Pi|\alpha'\rangle$是$\alpha$表象中的矩阵元.

以后为了书写方便起见，某一力学量L相应的线性变换Π也简写为L.

§3. 么正变换

上面曾经指出：一个状态或一个力学量在不同表象中具有不同的表达形式，但各种表象之间可以通过一定的变换，把它们联系起来。此外，不同时刻的态矢量也可通过一定的变换把它们联系起来，这是因为任何时刻的态矢量都是薛定格方程的解，这些解应满足一定的初条件；如果t_0时刻的态矢是$|A(t_0)\rangle$，则从薛定格方程解得t时刻的态矢$|A(t)\rangle$应满足：$|A(t_0)\rangle=|A(t)\rangle|_{t=t_0}$．即二者存在一定的关系．上述的两种变换都属于么正（Unitary）变换．相应的算符（或矩阵）用U表示.

定义：若一个线性算符（或矩阵）U的厄米共轭U^+等于U的逆算符（或逆矩阵）U^{-1}，则称U是么正的．即

$$U^+=U^{-1} \quad (1.20)$$

从定义看到：U必须有逆存在，而且它的逆U^{-1}应等于U^+．若用U左乘(1.20)式得$UU^+=1$，再用U右乘(1.20)式得

$U^+U=1$. 因此幺正算符的定义也可以改写成等价的表示式:

$$U^+U=UU^+=1 \qquad \cdots(1.20a)$$

如果态矢 $|\,\rangle$ 之间及力学量 L 之间的变换关系，可由幺正算符 U 按下列公式进行变换，则称为幺正变换:

$$\left.\begin{aligned}|A\rangle \longrightarrow |B\rangle &\equiv |A\rangle_U = U|A\rangle \\ L \longrightarrow M &\equiv L_U = ULU^{-1}\end{aligned}\right\} \qquad \cdots(1.21a)$$

其共轭量的变换为:

$$\left.\begin{aligned}\langle A| \longrightarrow \langle B| &\equiv {}_U\langle A| = \langle A|U^{-1} \\ L^+ \rightarrow M^+ &\equiv (L^+)_U = (L_U)^+ = UL^+U^{-1}\end{aligned}\right\} \qquad \cdots(1.21b)$$

由幺正变换的定义 (1.21a,b) 得到一系列重要性质: (i) 一个自厄算符 (或矩阵) $L=L^+$ 的本征值 L_n, 在幺正变换下不变. 因为如果 $|n\rangle$ 是 L 的一个本征态矢，相应的本征值是 L_n, 即 $L|n\rangle=L_n|n\rangle$. 那么,

$$\begin{aligned}ULU^{-1}U|n\rangle &= L_U|n\rangle_U = UL_n|n\rangle = L_nU|n\rangle \\ &= L_n|n\rangle_U\end{aligned}$$

(ii) 自厄算符的代数关系，在幺正变换下保持不变. 设算符 $A=A^+$, $B=B^+$, $C=C^+$ 满足如下对易关系: $[A,B]=C$, 进行幺正变换:

$$\begin{aligned}U[A,B]U^{-1} &= UAU^{-1}UBU^{-1}-UBU^{-1}UAU^{-1} \\ &= A_UB_U-B_UA_U=[A_U,B_U]=UCU^{-1}=C_U\end{aligned}$$

即代数关系与原来的相同. (iii) 幺正变换保持态矢的内积不变. 即 $\langle A|B\rangle=\langle A|U^{-1}U|B\rangle={}_U\langle A|B\rangle_U$

(iv) 幺正变换保持算符的平均值不变. 即

$$\langle A|L|B\rangle=\langle A|U^{-1}ULU^{-1}U|B\rangle={}_U\langle A|L_U|B\rangle_U$$

(v) 在幺正变换下，任何矩阵的对角线之和保持不变. 我们用

此为试读,需要完整PDF请访问: www.ertongbook.com

$T_r\Omega$ 代表矩阵 Ω 的对角线之和[称为矩阵迹(Trace或spur)]. 在么正变换下, $\Omega\to\Omega_U=U\Omega U^{-1}$. 故

$$T_r\Omega_U=T_r(U\Omega U^{-1})=T_r(U^{-1}U\Omega)=T_r\Omega.$$

现在讨论不同时间的态矢 $|A(t)>$ 之间的么正变换. 设 t_0 时刻体系的态矢量为 $|\psi(t_0)>$, t 时刻的态矢量为 $|\psi(t)>$. 它们之间的对应关系可写成:

$$|\psi(t)>=U(t,t_0)|\psi(t_0)> \qquad (1.22)$$

其中 $U(t,t_0)$ 是一个线性算符, 可由体系的总哈密顿量 H 及 t, t_0 决定(下章将仔细讨论). 由几率守恒的要求:

$$<\psi(t)|\psi(t)>=<\psi(t_0)|U^+(t,t_0)U(t,t_0)|\psi(t_0)>$$
$$=<\psi(t_0)|\psi(t_0)>$$

得到

$$U^+(t,t_0)U(t,t_0)=1 \qquad (1.23)$$

由于任何时刻之间的态矢量都应该是一一对应的, 于是

$$|\psi(t_0)>=U(t_0,t)|\psi(t)=U(t_0,t)U(t,t_0)|\psi(t_0)>$$

因此 $\quad U(t_0,t)U(t,t_0)=1$.

同理 $\quad U(t,t_0)|\psi(t_0)>=|\psi(t)>=U(t,t_0)U(t_0,t)|\psi(t)>$

即 $\quad U(t,t_0)U(t_0,t)=1$

由于 $\quad U(t_0,t)U(t,t_0)=U(t,t_0)U(t_0,t)$ 故有逆算符 $U^{-1}(t,t_0)$ 存在, 且 $U^{-1}(t,t_0)=U(t_0,t)$ 使得用 $U(t,t_0)$ 左乘和右乘相等. 由(1.23)式

$$U^+(t,t_0)U(t,t_0)=U(t_0,t)U(t,t_0)=U^{-1}(t,t_0)U(t,t_0)$$

所以 $\quad U^+(t,t_0)=U^{-1}(t,t_0)$, 即 $U(t,t_0)$ 是么正算符. 此外, $U(t,t_1)U(t_1,t_0)=U(t,t_0)$. 注意: 这里的证明只限于 t 和 t_0 保持有限时才有意义.

第二章 运动方程和对称性

§1. 薛定格绘景

一个力学体系的物理性质是由许多力学量（如坐标、动量等等）确定的，而这些量的实际测量值是平均值 $\bar{L}(t)=\langle\psi|L|\psi\rangle$。当平均值随时间变化时，我们有三种表达方法：一种是薛定格绘景（picture），它把体系的物理性质（用 $\bar{L}(t)$ 表征）随时间变化的原因归结为态矢量 $|\psi(t)\rangle$ 是时间函数，而力学量算符与时间无关（个别特殊情况，如 $\bar{t}$ 等，除外）；第二种是海森堡绘景，它把体系物理性质依赖于时间的原因，归结为力学量算符是时间的函数 $L(t)$，而态矢量 $|\psi\rangle$ 与时间无关；第三种是相互作用绘景，它认为算符和矢量均是时间的函数。

我们先讨论薛定格绘景。设 $|\psi_s\rangle$ 代表薛定格绘景中的态矢量，它依赖于时间 t，L_s 代表相应的算符，不随时间变化。态矢 $|\psi_s(t)\rangle$ 随时间变化的规律由薛定格方程及初始状态 $|\psi_s(t_0)\rangle$ 确定：

$$i\hbar\frac{\partial|\psi_s(t)\rangle}{\partial t}=H|\psi_s(t)\rangle \qquad \cdots(2.1)$$

在第一章的最后一节中，我们曾指出：由于几率守恒 $\langle\psi_s(t_0)|\psi_s(t_0)\rangle=\langle\psi_s(t)|\psi_s(t)\rangle$，所以总可以引入一个幺正算符 $U(t,t_0)$ 把 $|\psi_s(t)\rangle$ 和 $|\psi_s(t_0)\rangle$ 联系起来

$$|\psi_s(t)\rangle=U(t,t_0)|\psi_s(t_0)\rangle \qquad \cdots(2.2)$$

由初始条件：$|\psi_s(t)\rangle\big|_{t=t_0}=|\psi_s(t_0)\rangle$ 得到：

$$U(t_0,t_0)=1 \qquad \cdots(2.3)$$

将 (2.2) 式代到 (2.1) 式得到 $U(t,t_0)$ 所满足的方程式：

$$i\hbar\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t}\psi_s(t_0)=H(t)U(t,t_0)\psi_s(t_0) \qquad (2.4)$$

如果哈密顿量（Hamiltonian）$H(t)$ 不显含时间 t（即 $H(t)=H$），则满足初始条件 (2.3) 式的解为：

这个方程与 (2.1) 相当．求出算符 U 可由 ψ(0) 通过 (2.2) 式得 ψ(t

$$U(t,t_0)=e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} \quad \cdots\cdots(2.5)$$

若哈氏量显含时间（如散射中势随时间变化的情况），则满足(2.3)式的解为：

$$U(t,t_0)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}H(t')\,U(t',t_0)\,dt' \quad (2.6)$$

我们可以用迭代方法（或叫连续近似方法）求解这个积分方程。为了记忆方便，我们把 U 的性质概括如下：

$$\left.\begin{aligned}
&U(t_0,t_0)=1,\\
&U(t,t_0)=U^{-1}(t_0,t).\\
&U(t,t_1)\,U(t_1,t_0)=U(t,t_0)\\
&U^{-1}(t,t_0)=U^{+}(t,t_0)
\end{aligned}\right\}\text{么正算符} \quad \cdots\cdots(2.7)$$

其次讨论观测量 $\bar{L}(t)$ 随时间变化的情况，因为

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\bar{L}(t)&=\frac{d}{dt}\langle\psi_s(t)|L|\psi_s(t)\rangle\\
&=\langle\psi_s(t)|\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial t}L|\psi_s(t)\rangle+\langle\psi_s|L\frac{\partial}{\partial t}|\psi_s\rangle\\
&\quad+\langle\psi_s(t)|\frac{\partial L}{\partial t}|\psi_s(t)\rangle.
\end{aligned}$$

其中 $\langle\psi(t)|\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial t}\equiv\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|$.

由(2.1)式得： 表示作用方向函数.

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\psi_s(t)|L|\psi_s(t)\rangle&=\langle\psi_s(t)|\frac{\partial L}{\partial t}|\psi_s(t)\rangle\\
&\quad+\langle\psi_s(t)|\frac{1}{i\hbar}[L,H]|\psi_s(t)\rangle \quad (2.8)
\end{aligned}$$

其中 $[L,H]=LH-HL$. 在一般情况中算符 L 不显含时间，故 $\frac{\partial L}{\partial t}=0$. 可见，当 $[L,H]=0$ 时 $\frac{d}{dt}\bar{L}=0$. 即算符 L 对应的物理量是守恒量.

总之，薛定格绘景的特征是：态矢量随时间变化是由薛定格方程(2.1)式描写；力学量算符 L 一般不显含时间（在某些问题里面，例如依赖于时间的势散射，力学量显含时间，但仍用

薛定格表象处理，这时应记住 $\frac{\partial L}{\partial t} \neq 0$，但这时我们的兴趣是跃迁几率而不是力学量）。在实际计算中常用这个绘景，因为矢态（或波函数）随时间变化，可直接解微分方程式得到，它的缺点是薛定格方程式在罗伦兹变换下不是协变的。另外，当有相互作用存在时，薛氏方程将成为非齐次方程，而且常常也是非线性方程。求解这类方程远较求解线性齐次的自由粒子运动方程困难得多。

§2 海森堡（Heisenberg）绘景

设 $|\psi_H\rangle$，L^H，$|\psi_S(t)\rangle$，L^S 分别代表海森堡和薛定格绘景中的态矢量以及力学量算符，我们通过一个么正变换算符 $U(t,t_0)$ 把它们联系起来：

$$
\begin{aligned}
&|\psi_S(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi_H\rangle \\
&L^S = U(t,t_0)L^H U^{-1}(t,t_0), \qquad \cdots\cdots(2.9) \\
&U^+(t,t_0) = U^{-1}(t,t_0)
\end{aligned}
$$

由上式直接得到：

$$
\begin{aligned}
|\psi_H(t)\rangle &= U^{-1}(t,t_0)|\psi_S(t)\rangle = U^{-1}(t,t_0)\boxed{U(t,t_0)|\psi_S(t_0)\rangle} \\
&= |\psi_S(t_0)\rangle,
\end{aligned}
$$

即 $|\psi_H(t)\rangle$ 不随时间变化。在这里我们对 U 加了一个限制：即它将薛定格绘景中 t_0 时刻的态变成 t 时刻的态。其次找寻算符 L^H 服从的运动方程。因为 $L^H(t) = U^{-1}(t,t_0)L^S U(t,t)$，故有：

$$
\frac{dL^H(t)}{dt} = \frac{\partial U^{-1}(t,t_0)}{\partial t}L^S U(t,t_0) + U^{-1}(t,t_0)L^S\frac{\partial U(t,t_0)}{\partial t} \qquad \cdots\cdots(2.10)
$$

由（2.4）式：$i\hbar\frac{\partial U}{\partial t} = H^S U$ 及 $-i\hbar\frac{\partial U^{-1}}{\partial t} = U^{-1}H^S$ 得到：

$$
\begin{aligned}
\frac{dL^H(t)}{dt} &= \frac{i}{\hbar}\{U^{-1}H^S L^S U - U^{-1}L^S H^S U\} \\
&= \frac{i}{\hbar}\{U^{-1}UH^H U^{-1}\underline{UL^H U^{-1}}U - U^{-1}\underline{UL^H U^{-1}}UH^H U^{-1}U\} =
\end{aligned}
$$

$L^S = UL^H U^{-1}$

$\cancel{H^S = H^H}$，　$H^S = UH^H$

$$=\frac{i}{\hbar}\left[H^H L^H - L^H H^H\right] = \frac{i}{\hbar}\left[H^H, L^H\right] \quad \cdots(2.11)$$

如果 L^S 显含时间，则在（2.10）式的右边加上 $U^{-1}\frac{\partial L^S}{\partial t}U$ 项，这样（2.11）式变为：

$$\frac{dL^H}{dt} = \frac{i}{\hbar}\left[H^H, L^H\right] + U^{-1}\frac{\partial L^S}{\partial t}U \quad \cdots(2.12)$$

上式是海森堡表象中，算符随时间变化的方程式，从上式看到体系的状态由它的哈密顿量 H 决定：这和薛定格绘景的情况相类似，当一个体系的哈密顿量给定后，在薛定格绘景中可通过求解薛氏方程而决定态矢量（或波函数）；在海森堡绘景中，则通过解算符方程（2.12）而给出算符的具体表示式，后者可以与经典力学中的正则描述联系起来，在经典力学中一个保守系的广义坐标 q_i 和广义动量 P_i 满足哈密顿方程：

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial P_i} = [q_i, H]_P$$

$$\frac{dP_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = [P_i, H]_P$$

其中 $[A, B]_P = \sum_i\left[\frac{\partial A}{\partial q_i}\frac{\partial B}{\partial P_i} - \frac{\partial A}{\partial P_i}\frac{\partial B}{\partial q_i}\right]$ 为泊松（Poisson）括号，H 为哈氏量。可见如果把 L 看作广义坐标或广义动量的算符；则海森堡表述方式与经典力学的正则表述方式有如下对应关系：

$$q \longleftrightarrow \hat{q},\quad P \longleftrightarrow \hat{P},\quad H \longleftrightarrow \hat{H},\quad [\ \ ]_P \longleftrightarrow \text{对易子}[\ \ ]\times\frac{1}{i\hbar}$$

正则运动方程 $\longleftrightarrow$ 算符运动方程

其 $\hat{H}$，$\hat{q}$ 等代表相应量的算符。

其次，当体系的总哈密顿量 H 不显含时间时，（2.4）式给出 $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H^S(t-t_0)}$，将此式代到（2.9）式：

$$H^S U(t, t_0) = H^S e^{-\frac{i}{\hbar}H^S(t-t_0)} = U(t, t_0)H^H$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}H^S(t-t_0)}H^H \quad \cdots(2.13)$$

由于 $[H^S, e^{-\frac{i}{\hbar}H^S(t-t_0)}]=0$，故得到：

$$H^S = H^H \equiv H \qquad ---(2.13a)$$

即当哈氏量不显含时间时，两种绘景的哈密顿量相等．以后为书写方便，我们用 H 代表；当 H 显含时间时，我们再说明是属于哪种绘景中的哈氏量．

最后指出：两种绘景的等价性：(i) 几率相等

$\langle\psi_S|\psi_S\rangle = \langle\psi_H|U^+U|\psi_H\rangle = \langle\psi_H|\psi_H\rangle$ (ii) 观测量 L 相等：$\langle\psi_S|L^S|\psi_S\rangle = \langle\psi_H|U^+L^SU|\psi_H\rangle = \langle\psi_H|L^H|\psi_H\rangle$

(iii) 由于从一种绘景过渡到另一个绘景是进行幺正变换实现的，由幺正变换的性质得到：算符的对易关系在这两个绘景中具有相同的形式．

海森堡绘景的优点是：运动方程具有经典正则方程的形式，因此可以仿照经典力学的方法处理量子力学体系，进一步可以推广到量子场论．它的缺点是：对每个力学量都必须求解相应的方程，而这些方程往往是难以求解的．

§3. 相互作用绘景

从上面两节的论述中看到：在薛定格绘景中态矢量随时间变化，服从薛氏方程；在海森堡绘景中算符随时间变化服从正则运动方程；如果体系的哈密顿量给定后，便可求出它们的具体表示式，从而确定体系的状态．当体系与外界（或子体系之间）存在相互作用 H' 时，把无相互作用的哈密顿量 H_0 从 H 中分离出来，对计算是很方便的．即

$$H = H_0 + H' \qquad (2.14)$$

引入相互作用绘景（有时也叫相互作用表象），在该绘景中的态矢量 $|\psi_I(t)\rangle$ 和力学量（算符）L^I 与薛定格绘景的相应量，可用如下幺正算符 $R(t,t_0)$（$R^+(t,t_0)=R^{-1}(t,t_0)$）联系起来：

此为试读,需要完整PDF请访问: www.ertongbook.com