

量子力学中三种绘景

林仁明

(福建师范大学物理系)

描述量子系统随时间的运动有三种不同而又相互等价的方式,称为绘景(picture 或 representation, 又译作图景或表象),它们是海森堡绘景、薛定谔绘景和作用绘景,有关绘景的问题,是量子力学中最基本的问题之一。对于前两种绘景问题的讨论,可以追溯到量子力学建立初期关于薛定谔的波动力学(1926年)与海森堡的矩阵力学(1925年)等价性的讨论。

绘景问题的重要性不仅在于它的应用,也在于它的提出及发展与量子力学几条公理性假设的提出及发展紧密相关。

一般量子力学和量子场论的专著都要介绍这三种绘景,但大多只是给出其定义及有关公式,以致人们不容易领会其物理实质。本文试图从量子力学的几条公理性假设出发来讨论这三种绘景,并在 Hilbert 空间中给出这三种绘景的联系、区别及等价性的直观几何图象,使读者能较深入了解这三种绘景,从而澄清一些可能发生的误解。

一、问题的提出

根据量子力学公理性假设之一:一量子系统的态可用 Hilbert 空间的一个矢量 $|\psi\rangle$ (以下称态矢)来描述;而系统的每一可观察力学量对应于作用于空间中的一个厄米算符。

我们选取某力学量算符 A , 并设它有一组完备正交归一的本征基矢

$$\{|a_i\rangle\} = \{|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots\}$$

有

$$A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle, \quad (1)$$

$$\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = I, \quad (2)$$

$$\langle a_i|a_j\rangle = \delta_{ij}. \quad (3)$$

这里设本征值 a_i 取分立值,不难推广到取连续值的情况。系统的任一态矢 $|\psi\rangle$ 可按基矢 $\{|a_i\rangle\}$ 展成

$$|\psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle\langle a_i|\psi\rangle = \sum_i c_i|a_i\rangle, \quad (4)$$

其中 $c_i = \langle a_i|\psi\rangle$ 。(4)式可以用直观的几何图象来

描述。将 $\{|a_i\rangle\}$ 看作 Hilbert 空间中选定的正交坐标轴的单位方向矢量。态矢 $|\psi\rangle$ 是空间中一个矢量(见图 1)。矢量 $|\psi\rangle$ 在 $|a_i\rangle$ 轴上的投影或坐标分量即为 $c_i = \langle a_i|\psi\rangle$ 。

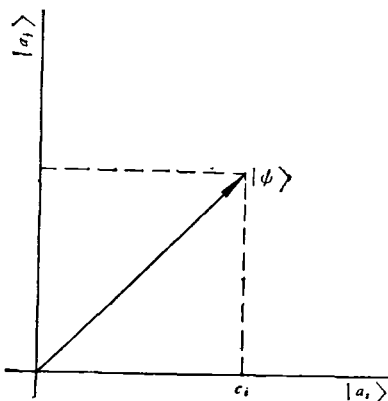


图 1

以上的讨论没有提到时间的问题,因此可以认为这是在一时刻 $t = t_0$ 时的情况。当时间变化,系统随时间而运动。既然描述系统的量只有 $|\psi\rangle$ 和 A , 因此描述系统随时间的运动不外乎下面三种方式(系统随时间运动的性质):

1. 完全反映在态矢随时间的变化上,而算符与时间无关。这就是薛定谔绘景;
2. 完全反映在算符随时间的变化上,而态矢与时间无关。这就是海森堡绘景;
3. 部分反映在态矢随时间的变化,部分反映在算符随时间的变化。这就是作用绘景。

应当指出,这三种不同的绘景只是对同一个量子系统随时间运动采取不同的描述方式,当然我们必须要求这三种绘景是等价的。由于态矢 $|\psi\rangle$ 或波函数 $\langle a_i|\psi\rangle$ 以及算符 A 本身都是不能直接测量的,所能测量到的是由下述量子力学公理性假设之二所确定的力学量的期待值和几率。

量子力学公理性假设之二:

1. 力学量 A 的测量值只能是相对应的算符的本征值之一。

2. 力学量 A 在任意态 $|\psi\rangle$ 中测得的平均值(期待值)为

$$a = \langle \psi | A | \psi \rangle. \quad (5)$$

态矢 $|\psi\rangle$ 中出现本征值为 a_i 的本征态 $|a_i\rangle$ 的几率为

$$|C_i|^2 = |\langle a_i | \psi \rangle|^2. \quad (6)$$

由(5),(6)式所求得的数量代表最基本的物理结果. 因此,要求三种绘景是等价的,就等于要求在三种绘景中依据(5),(6)式求出的量必须相等.

二、薛定谔绘景

在薛定谔绘景(以下简称 S. P.)中,认为态矢 $|\psi\rangle$ 与 t 有关,写作 $|\psi_S(t)\rangle$;力学量与 t 无关,写作 A_S . 因此 A_S 的运动方程是

$$dA_S/dt = 0. \quad (7)$$

现在来求 $|\psi_S(t)\rangle$ 的运动方程. 依据量子力学公理性假设之三:量子系统态的运动必须遵守因果律. 这一假设的数学表示是,设 $t=t_0$ 时,态矢为 $|\psi_S(t_0)\rangle$;在 t 时为 $|\psi_S(t)\rangle$. 这两态矢之间可通过反映因果联系的么正算符 $u(t, t_0)$ 来联系,即

$$|\psi_S(t)\rangle = u(t, t_0) |\psi_S(t_0)\rangle. \quad (8)$$

已知,一个么正算符总可以写成如下的指数形式:

$$u(t, t_0) = e^{-(i/\hbar)H(t-t_0)} \equiv u, \quad (9)$$

其中, H 是厄米算符. 根据量纲分析可知 H 应有能量的量纲. 因此, (8) 式可写成:

$$|\psi_S(t)\rangle = u |\psi_S(t_0)\rangle = e^{-(i/\hbar)H(t-t_0)} |\psi_S(t_0)\rangle. \quad (10)$$

(10)式的几何图象是态矢 $|\psi_S(t_0)\rangle$ 是在 t_0 时刻在空间中取一确定方向的矢量,在算符 u 作用下,转动到 t 时刻 $|\psi_S(t)\rangle$ 矢量方向如图 2. 因此, $u(t, t_0)$ 可以看

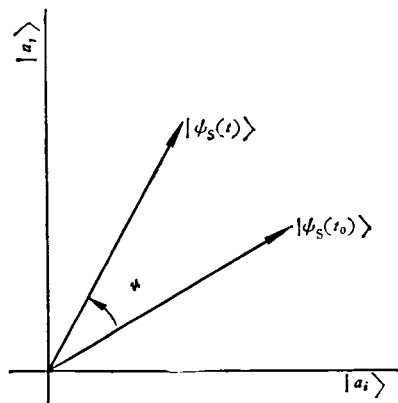


图 2

作 Hilbert 空间中使态矢产生随时间转动的算符.

对于小的时间间隔 $\Delta t = t - t_0$, $u \cong 1 - (i/\hbar)H\Delta t$, (10) 式可化为

$$|\psi_S(t_0 + \Delta t)\rangle = (1 - (i/\hbar)\Delta t H) |\psi_S(t_0)\rangle,$$

取极限 $\Delta t \rightarrow 0$, 上式化为

物理

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_S(t)\rangle = H |\psi_S(t)\rangle. \quad (11)$$

这正是在 S. P. 中态矢的运动方程,又称为薛定谔方程. 因此,薛定谔方程的物理实质是使态矢在 Hilbert 空间中实现无穷小的转动. (11) 式中 H 可合理地解释为哈密顿算符(见下).

在 S. P. 中,态矢 $|\psi_S(t)\rangle$ 随时间而变化,但坐标轴 $|a_i\rangle$ 是固定不动的. $|\psi_S(t)\rangle$ 可展成

$$|\psi_S(t)\rangle = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i | \psi_S(t)\rangle = \sum_i |a_i\rangle C_i(t). \quad (12)$$

其中, $C_i(t) = \langle a_i | \psi_S(t)\rangle$. 我们知道在普通几何空间中,矢量随时间的变化可以归结为这个矢量的各个坐标分量 C_i 随时间的变化 ($C_i(t)$), (12) 式正是反映在 Hilbert 空间中的这样的几何图象.

A_S 的期待值,依据(5)式有

$$\langle \psi_S(t) | A_S | \psi_S(t)\rangle = \sum_i |C_i(t)|^2 a_i = a(t), \quad (13)$$

(13) 式是 A_S 的期待值 $a(t)$ 随时间变化的公式. 由式可知 $|C_i(t)|^2$ 代表 t 时刻对 A_S 的测量值为 a_i 的几率,故(13)式正是 t 时刻对 A_S 测量的平均值.

三、海森堡绘景

在海森堡绘景(以下简称 H. P.)中,态矢与 t 无关写作 $|\psi_H\rangle$. 这等于说在 H. P. 中,我们应当在空间中选取一个固定的方向的矢量当作态矢. 当然,这个固定矢量的选取是任意的. 我们选取 $t = t_0$ 时 Hilbert 空间的矢量 $|\psi_S(t_0)\rangle$ 当作 $|\psi_H\rangle$, 即

$$|\psi_H\rangle \equiv |\psi_S(t_0)\rangle. \quad (14)$$

根据(10)式可以求得 H. P. 中 $|\psi_H\rangle$ 与 S. P. 中 $|\psi_S(t)\rangle$ 的变换关系为

$$|\psi_H\rangle = e^{(i/\hbar)H(t-t_0)} |\psi_S(t)\rangle = u^{-1} |\psi_S(t)\rangle. \quad (15)$$

这等于说,在 H. P. 中是将 S. P. 中的态矢逆向转到 t_0 时的 $|\psi_S(t_0)\rangle$ 上当作 H. P. 的态矢 $|\psi_H\rangle$. 因此, $|\psi_H\rangle$ 的运动方程是

$$\frac{d}{dt} |\psi_H\rangle = 0 \quad (16)$$

在 H. P. 中算符与 t 有关,写作 $A_H(t)$. 根据在不同绘景中力学量期待值即(5)式计算的量必须相等的要求,有

$$\langle \psi_H | A_H(t) | \psi_H \rangle = \langle \psi_S(t) | A_S | \psi_S(t) \rangle = a(t).$$

将(15)式代入上式左边得

$$\langle \psi_S(t) | u A_H(t) u^{-1} | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_S(t) | A_S | \psi_S(t) \rangle,$$

对比双方即得 $A_H(t)$ 与 A_S 的变换关系

$$A_H(t) = u^{-1} A_S u = e^{(i/\hbar)H(t-t_0)} A_S e^{-(i/\hbar)H(t-t_0)}. \quad (17)$$

不难看出,在 $t = t_0$ 时 $A_H(t_0) = A_S$. 因此在 $t = t_0$ 时这两绘景重合,这是因为对于给定的时刻就无所谓绘景.

现在来求 $A_H(t)$ 的本征基矢。 $A_H(t)$ 因 t 而异, 这表示不同时刻的 $A_H(t)$ 是代表不同的算符, 必然具有不同的本征基矢。 我们可以形式地把 $A_H(t)$ 的本征基矢写作 $\{|a_i, t\rangle\}$, 其中 t 是参数, 表示不同时刻本征矢是不同的。 根据本征矢的定义, 有

$$A_H(t)|a_i, t\rangle = a_i|a_i, t\rangle, \quad (18)$$

按不同绘景几率 $|C_i(t)|^2$ 应当相等的(6)式的要求应有

$$|C_i(t)|^2 = |\langle a_i, t|\psi_H\rangle|^2 = |\langle a_i|\psi_S(t)\rangle|^2. \quad (19)$$

将(15)式代入上式右边, 比较双方可得

$$|a_i, t\rangle = U^{-1}|a_i\rangle = e^{(i/\hbar)H(t-t_0)}|a_i\rangle. \quad (20)$$

在 H. P. 中, 由于将态矢固定为 $|\psi_H\rangle$, 因此只好让坐标轴逆向转动[即(20)式]。 只有这样才能做到矢量在坐标轴上投影 $C_i(t)$, 随 t 而变, 且与 S. P. 中的相等的要求(见图 3)。 在普通的几何空间中描述空间矢量

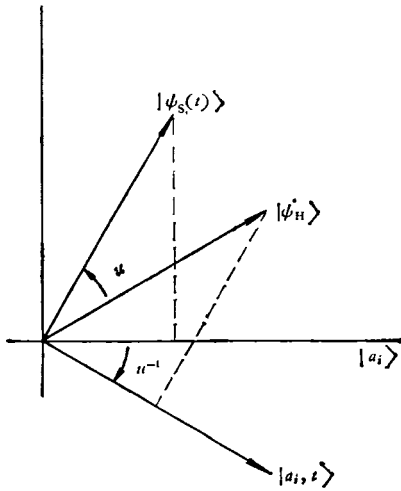


图 3

的转动也是采取这样两种办法, 一是认为坐标轴不动, 而矢量转动, 一是认为矢量不动, 而坐标轴逆向转动, 前者相当于 S. P., 后者相当于 H. P.

对(17)式两边求时间微商, 即可求得 H. P. 中算符的运动方程

$$i\hbar \frac{dA_H(t)}{dt} = [A_H(t), H]. \quad (21)$$

根据量子力学经典极限对应原理, 可见上式中的 H 应当解释为哈密顿量。 (21) 式中 H 仍然采用由(9)式所定义的 S. P. 中的算符 H_S 。 而在 H. P. 中只要将 $A_H = H_H$ 代入(17)式, 即可证明 $H_H = H_S = H$, 与 t 无关。

这里可能会产生一个问题, 既然在 H. P. 中 H 与 t 无关, 那么, H 的本征矢 $|m, t\rangle$ 是否与 t 也无关呢? 设在 S. P. 中 $H|n\rangle = E_n|n\rangle$, 利用(20)式求得

$$|n, t\rangle = e^{(i/\hbar)H(t-t_0)}|n\rangle = e^{(i/\hbar)E_n(t-t_0)}|n\rangle.$$

可见在 H. P. 中 H 的本征矢 $|n, t\rangle$ 与 t 有关, 但在 Hilbert 空间中并没有转动, 只是多了一个与 t 有关的 e 数相因子。

四、作用绘景

在作用绘景中是认为态矢和算符均与 t 有关, 分别写成 $|\psi_I(t)\rangle, A_I(t)$ 。 为要做到这点, 我们仍从(10)式出发, 设哈密顿 H 可以划分成两部分 H_0 和 H' 之和

$$H = H_0 + H'. \quad (22)$$

这种分解是任意的, 但在什么情况下才是切实可行等问题, 读者可参阅文献[1]。 在作用绘景中, 我们定义态矢 $|\psi_I(t)\rangle$ 与 S. P. 中态矢 $|\psi_S(t)\rangle$ 的关系如下:

$$|\psi_I(t)\rangle = u_0^{-1}|\psi_S(t)\rangle = e^{(i/\hbar)H_0(t-t_0)}|\psi_S(t)\rangle. \quad (23)$$

将 u_0^{-1} 作用于(10)式两边, 并与上式比较即得

$$|\psi_I(t) = u_0^{-1}|\psi_S(t)\rangle = u_0^{-1}u|\psi_H(t)\rangle. \quad (24)$$

这正是三种绘景中态矢的变换公式。 注意, 由于 H_0 与 H' 不一定可对易, 故 u_0^{-1} 与 u 的次序不能随意交换。 由(24)式可知, $|\psi_I(t)\rangle$ 是从 $|\psi_S(t)\rangle$ 逆向转动 u_0^{-1} 而达到的, 或者从 $|\psi_H\rangle$ 先正向转 u , 然后再逆转 u_0^{-1} 而达到(见图 4)。

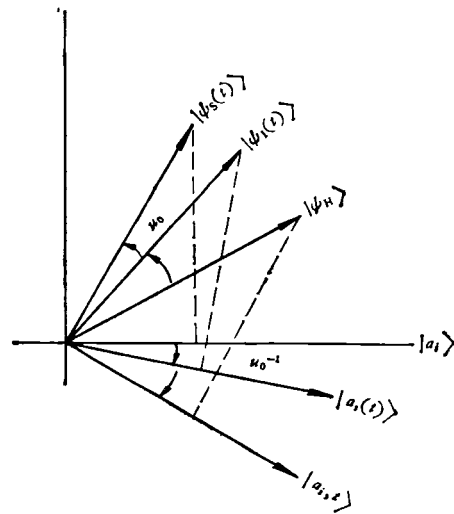


图 4

根据(5)式期待值相等的要求, 有

$$\langle \psi_I(t)|A_I(t)|\psi_I(t)\rangle = \langle \psi_S(t)|A_S|\psi_S(t)\rangle = \langle \psi_H|A_H(t)|\psi_H\rangle,$$

将(24)式代入上式中, 把式中 $|\psi_S(t)\rangle, |\psi_H\rangle$ 变换为 $|\psi_I(t)\rangle$, 然后比较各边即得三种绘景中算符变换公式

$$A_I(t) = u_0^{-1}A_S u_0 = u_0^{-1}u A_H(t) u^{-1} u_0. \quad (25)$$

对(23)式双方求时间微商, 并注意

$$H = H_0 + H'$$

及

$$H'_1(t) = u_0^{-1} H' u_0,$$

求得 $|\psi_I(t)\rangle$ 的运动方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = H'_1(t) |\psi_I(t)\rangle. \quad (26)$$

对 (25) 式第一个等式双方求时间微商, 并注意到 $(H_0)_1 = u_0^{-1} H_0 u_0 = H_0$, 求得 $A_1(t)$ 的运动方程:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_1(t) = [A_1(t), H_0]. \quad (27)$$

现在来求 $A_1(t)$ 的本征基矢 $|a_i(t)\rangle$. 根据 (6) 式几率相等要求, 应有

$$|\langle a_i(t) | \psi_I(t) \rangle|^2 = |\langle a_i | \psi_S(t) \rangle|^2 = |\langle a_i, t | \psi_H \rangle|^2.$$

将 (24) 式代入上式, 将 $|\psi_S(t)\rangle$ 和 $|\psi_H\rangle$ 均变换为

$|\psi_I(t)\rangle$, 比较后得

$$|a_i(t)\rangle = u_0^{-1} |a_i\rangle = u_0^{-1} u |a_i, t\rangle. \quad (28)$$

因此, $|a_i(t)\rangle$ 是从 $|a_i\rangle$ 逆向转 u_0^{-1} 而达到, 或从 $|a_i, t\rangle$ 正向转回到 $|a_i\rangle$ 再逆向转 u_0^{-1} 而达到 (见图 4). 从图 4 中可以看到, 三个绘景的态矢 $|\psi_S(t)\rangle$, $|\psi_I(t)\rangle$ 和 $|\psi_H\rangle$ 分别向 $|a_i\rangle$, $|a_i(t)\rangle$ 和 $|a_i, t\rangle$ 的投影相等. 由图可见, 三个绘景中的态矢和算符 A 的本征基矢的相互位置, 从图即可以求得它们之间的相互转换关系. 当 $t = t_0$, $u_0 = u = I$, 这时三种绘景完全重合.

参 考 文 献

- [1] 李政道, 场论与粒子物理, 上册, 科学出版社, (1980), 第五章, 43.

(上接 228 页)

显减弱, 湮没在 Mn^{2+} 的第四条标线中. 这是由于退火处理后 $SrTiO_3$ 晶体中 Ti^{3+} 大大减少的缘故. 因此这也排除了原谱线是由其它过渡族离子产生的可能性.

图 4 是同样放大倍数不加 Mn^{2+} 标线时对退火前后两种情况测量的电子顺磁共振谱线.

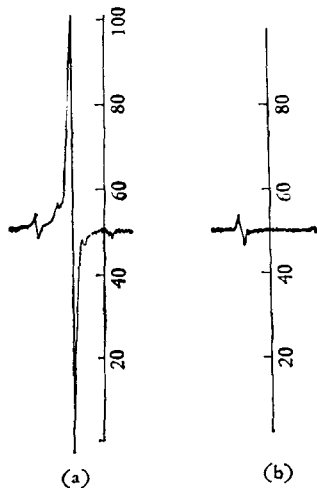


图 4 $SrTiO_3$ 样品退火前后电子顺磁共振谱的比较
(a) 退火前; (b) 退火后

可见退火处理后晶体的缺氧缺陷大为减少.

综上所述, 我们对助熔提拉法生长的 $SrTiO_3$ 单晶进行电子顺磁共振测量, 没有观察到 Fe^{3+} 及其它杂质的谱线, 说明此法生长的 $SrTiO_3$ 单晶质量较纯, 但缺氧缺陷较严重. 这可通过退火处理来改善. 用电子顺磁共振法检测 $SrTiO_3$ 单晶是否缺氧是有效的.

本文曾与叶佩弦、常英传、李从周等同志进行有益的讨论, 样品由常英传、侯德森同志提供, 本实验由南开大学元素研究所王者福、张增佑和中科院化学所顺磁组的同志协助进行测量, 在此一并表示感谢.

参 考 文 献

- [1] K. A. Müller, *Helv. Phys. Acta*, **31**(1958), 173.
 [2] E. S. Kirkpatrick, K. A. Müller, R. S. Rubing, *Phys. Rev.*, **135**(1964), A86.
 [3] H. Unoki, T. Sakudo, *J. Phys. Soc. Japan*, **23**(1967), 546.
 [4] Th. Von. Waldkirch, K. A. Müller, W. Berlinger, *Phys. Rev. B*, **5**(1972), 4324.
 [5] K. A. Müller, W. Berlinger, *Phys. Rev. Letters*, **32**(1974), 160.
 [6] 黄武汉、林福成, 量子顺磁放大器原理, 科学出版社, (1965).