*§5 力学量算符及其本征值问题

以位矢 $\vec{r}$ 为自变量的空间，称“位置表象”。

在量子力学中，

处理诸如动量、角动量

和能量等力学量问题时，

需要将这些力学量 “算符化”。

一. 力学量算符的引入

一维自由粒子波函数 $\Psi(x,t)=\Psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et-p_x x)}$

对 Ψ 求导，得到方程：

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=-\frac{i}{\hbar}E\Psi(x,t) \longrightarrow \boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\to E}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x,t)=\frac{i}{\hbar}p_x\Psi(x,t) \longrightarrow \boxed{-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\to p_x}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t)=-\frac{p_x^2}{\hbar^2}\Psi(x,t) \longrightarrow \boxed{-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\to p_x^2}$$

由以上对波函数的求导操作得到物理启示：

定义**能量算符**、**动量算符**和**坐标算符**分别为

$$\boxed{\hat{E} \equiv i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \ , \quad \hat{p}_x \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \ , \quad \hat{x} \equiv x}$$

将它们作用到一维自由粒子波函数上，有

$$\hat{E}\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left[\Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} \right] = E\Psi(x,t)$$

$$\hat{p}_x \Psi(x,t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\left[\Psi_0 e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x - Et)} \right] = p_x \Psi(x,t)$$

$$\hat{x}\ \Psi(x,t) = x\Psi(x,t)$$

所以在位置表象中，算符化的规则是：

$$\vec{r} \to \hat{\vec{r}} = \vec{r}, \quad \vec{p} \to \hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla, \quad E \to \hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

坐标函数的力学量，其量子力学所对应的算符形式不变。如势能$U(\vec{r})$和作用力$f(\vec{r})$ 。

与动量有关的经典力学量，其量子力学所对应的算符可用动量的对应关系得出。

例如，动能算符的表达式： 由 $E_k = \dfrac{p^2}{2m}$，

给出 $$\hat{E}_k = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

（在直角坐标中）

角动量算符的表达式：

$$\hat{\vec{L}} = \hat{\vec{r}} \times \hat{\vec{p}} = -i\hbar\, \hat{\vec{r}} \times \nabla$$

在直角坐标中：

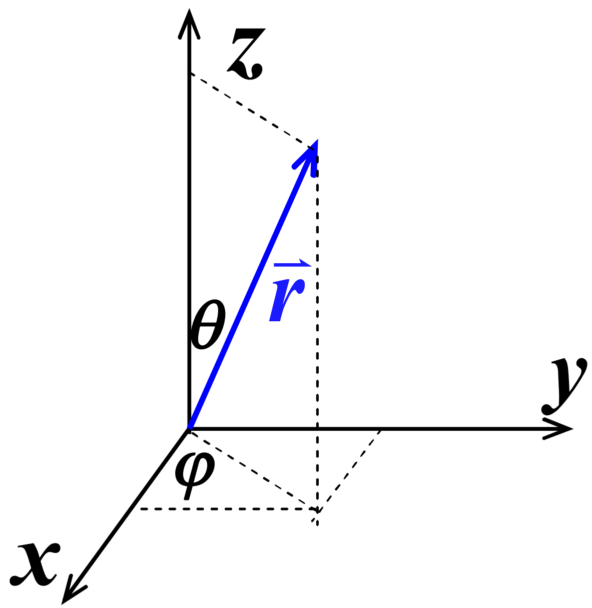
$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial}{\partial z}\vec{k}$$

$$\begin{cases} \hat{L}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y = -i\hbar\left(y\dfrac{\partial}{\partial z} - z\dfrac{\partial}{\partial y}\right) \\ \hat{L}_y = z\hat{p}_x - x\hat{p}_z = -i\hbar\left(z\dfrac{\partial}{\partial x} - x\dfrac{\partial}{\partial z}\right) \\ \hat{L}_z = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\hbar\left(x\dfrac{\partial}{\partial y} - y\dfrac{\partial}{\partial x}\right) \end{cases}$$

在球极坐标中：

$$x = r\sin\theta\cos\varphi;\ y = r\sin\theta\sin\varphi;\ z = r\cos\theta$$

$$\begin{cases} \hat{L}_x = i\hbar(\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}) \\ \hat{L}_y = i\hbar(-\cos\varphi\dfrac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{ctg}\,\theta\sin\varphi\dfrac{\partial}{\partial\varphi}) \\ \hat{L}_z = -i\hbar\dfrac{\partial}{\partial\varphi} \end{cases}$$



角动量算符的模方为：

$$\hat{L}^2 = \hat{\vec{L}}\cdot\hat{\vec{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2,$$ （直角坐标）

$$= -\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]$$ （球极）

任一力学量 $A(\vec{r},\vec{p}) \rightarrow \hat{A}(\vec{r},-i\hbar\nabla)$

（经典）　　（量子）

二. 力学量算符的本征值和本征函数

当算符 $\hat{A}$ 作用在函数 ψ_n 上，若其结果是同一个函数乘以一个常量时：

$$\boxed{\hat{A}\psi_n = A_n\psi_n}$$

（例如 $\frac{\partial}{\partial x}e^{ax} = a \cdot e^{ax}$）

称上式为算符 $\hat{A}$ 的本征方程（**eigenequation**）

A_n 称为力学量 A 的一个本征值（**eigenvalue**）

ψ_n 描述力学量 A 取确定值 A_n 时的本征态

ψ_n 称为相应于 A_n 的本征函数（**eigenfunction**）

由本征方程解出的全部本征值就是相应力学量的可能取值。

$\{A_1, A_2 \cdots\}$构成力学量 A的本征值谱（spectrum）

$\{\psi_1, \psi_2 \cdots\}$构成力学量$A$的本征函数系

$\hat{A}$的本函数 ψ_n 是 A 取定值A_n的本征态。

在态ψ_n上测量力学量 A，只能测得A_n。

如定态薛定谔方程：$\hat{H}\Phi(x) = E\Phi(x)$

就是能量的本征方程，$\hat{H}$ 就是能量算符，

Φ_n就是能量取本征值E_n时的本征函数。

例如：动量算符$\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ 的本征方程是

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Phi_{p_x} = p_x\Phi_{p_x}$$

在直角坐标系下，该动量本征方程的解为：

$$\Phi_{p_x}(x) = \frac{1}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}p_x \cdot x}$$

这正是一维自由粒子波函数的空间部分，

它给定了自由粒子的动量p_x。

三. 本征函数的性质（以一维为例）

1. $\hat{A}$ 的本函数 $\psi_n(x)$ 是 A 取定值 A_n 的态。

在态 $\psi_n(x)$ 上测量力学量 A，只能测得 A_n。

2. $\hat{A}$ 的本函数系 $\{\psi_n(x)\}$ 构成正交、归一的完备函数系：

（1）本征函数总可以归一化：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x)\psi_n(x)\,\mathrm{d}x=1$$

（2）本征函数有正交性（可严格证明）：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*(x)\psi_n(x)\,\mathrm{d}x=\delta_{mn}=\begin{cases}1, & m=n\\ 0, & m\neq n\end{cases}$$

（3）本征函数具有完备性：

任一物理上合理的归一化波函数，都可由力学量 A 的本征函数系展开：

$$\Psi(x)=\sum_{n=1}^{\infty}C_n\psi_n(x)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty}|C_n|^2=1$$

$|C_n|^2$为$\Psi(x)$中包含$\psi_n(x)$状态的百分比。

3. 力学量 A 的平均值

在状态 $\Psi(x)$上对力学量A作多次（大数）测量， 则 A 的平均值为

$$\overline{A} = \sum_{n=1}^{\infty} \left| C_n \right|^2 A_n$$

可以证明有

$$\boxed{\overline{A} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x) \hat{A} \Psi(x) \mathrm{d}\,x}$$

即由本征函数可计算力学量的平均值。