7：动量和坐标表象下的波函数

#Quantum_Mechanics

有一些量子力学课本是从"波函数"讲起的，现在，我们终于要研究波函数了。为了简化，我们只考虑一维的情况。首先我们将态矢在位置算符的本征矢量上展开，此时，态矢可以写为：

$$|\alpha\rangle = \int dx'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle$$

我们知道，展开系数的平方 $|\langle x'|\alpha\rangle|^2 dx$ 是粒子出现在 $[x', x'+dx']$ 区域的概率密度。我们将下面的内积定义为坐标表象下的波函数：

$$\psi_\alpha(x') = \langle x'|\alpha\rangle$$

考虑两个态矢的内积：

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \int dx'\langle\beta|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int dx'\psi^\star_\beta(x')\psi_\alpha(x')$$

因此，$\langle\beta|\alpha\rangle$ 反映了态 $|\beta\rangle$ 和态 $|\alpha\rangle$ 的重叠程度。我们现在将态 α 先在一个算符 A 的本征态上展开：

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$$

左右两侧同时与 $|x'\rangle$ 内积得到：

$$\langle x'|\alpha\rangle = \sum_{a'}\langle x'|a'\rangle\langle a'|\alpha\rangle$$

我们可以将波函数写成如下形式：

$$\psi_\alpha(x') = \sum_{a'} c_{a'}u_{a'}(x') \quad u_{a'}(x') = \langle x'|a'\rangle$$

我们还可以考虑如何将 $\langle\beta|A|\alpha\rangle$ 写成波函数的形式：

$$\begin{aligned}\langle\beta|A|\alpha\rangle &= \int dx'\int dx''\langle\beta|x'\rangle\langle x'|A|x''\rangle\langle x''|\alpha\rangle \\ &= \int dx'\int dx''\psi^\star_\beta(x')\langle x'|A|x''\rangle\psi_\alpha(x)\end{aligned}$$

如果算符 A 可以用位置算符 X 表示, 那么上式将被大大简化。一个例子是 $A=X^2$，此时我们有:

$$\langle x'|X^2|x''\rangle = \langle x'|\cdot x''^2|x''\rangle = x'^2\delta(x'-x'')$$

利用 δ 函数的筛选性质重新计算积分，就得到:

$$\langle\beta|X^2|\alpha\rangle = \int dx'\langle\beta|x'\rangle x'^2\langle x'|\alpha\rangle = \int dx'\psi_\beta^\star(x')x'^2\psi_\alpha(x')$$

对于 $A=f(X)$ 的特殊情况，重复上述推导，可以得到:

$$\langle\beta|f(X)|\alpha\rangle = \int dx'\psi_\beta^\star(x')f(x')\psi_\alpha(x')$$

现在我们考虑坐标表象下的动量算符，为此，我们直接计算（给一个态矢做个微小平移）:

$$\begin{aligned}\left(1-\frac{iP\Delta x'}{\hbar}\right)|\alpha\rangle &= \int dx'\mathscr{F}(\Delta x')|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx'|x+\Delta x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx'|x'\rangle\langle x'-\Delta x'|\alpha\rangle \\ &= \int dx'|x'\rangle(|x'|\alpha\rangle - \Delta x'\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle)\end{aligned}$$

对比左右两侧，我们直接看出:

$$P|\alpha\rangle = \int dx'|x'\rangle\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\right)$$

利用各个 $|x'\rangle$ 之间的正交性，我们可以筛选出唯一的分量:

$$\langle x'|P|\alpha\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle$$

特别地，我们有:

$$\langle x'|P|x''\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta(x'-x'')$$

我们还可以得到:

$$\langle\beta|P|\alpha\rangle = \int dx'\langle\beta|x'\rangle\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|\alpha\rangle\right) = \int dx'\psi_\beta^\star(x')\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\right)\psi_\alpha(x)$$

通过重复上面的推导，我们可以得到：

$$\langle x'|P^n|\alpha\rangle = (-i\hbar)^n\frac{\partial^n}{\partial x'^n}\langle x'|\alpha\rangle$$

以及：

$$\langle\beta|P^n|\alpha\rangle = \int dx'\psi_\beta^\star(x')(-i\hbar)^n\left(\frac{\partial^n}{\partial x'^n}\right)\psi_\alpha(x)$$

有些书上会将 $\langle\alpha|P|\beta\rangle$ 作为一条额外的公理引入，我们这里显然不需要。

波函数既然可以在坐标表象下写出，那么它自然可以在动量表象下写出。一个态矢在动量算符 P 的本征矢量下分解为：

$$|\alpha\rangle = \int dp'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle$$

同样地，我们将展开系数定义为动量表象下的波函数：

$$\phi_\alpha(p') = \langle p'|\alpha\rangle$$

我们自然会问坐标表象和动量表象究竟有什么联系，对于离散的情况来说，基底变换矩阵中的元素都是 $\langle\alpha|\beta\rangle$，因此这里我们自然也希望基底变换的所有信息包含在 $\langle x|p\rangle$ 中。为了导出它的显式形式，我们考虑到：

$$\langle x'|P|p'\rangle = p'\langle x'|p'\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\langle x'|p'\rangle$$

那么现在解出 $\langle x'|p'\rangle$ 的具体形式：

$$\langle x'|p'\rangle = N\exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right)$$

其中 N 是某个归一化常数，我们一会儿再确定。这里解微分方程的时候，实际上我们是将 $\langle x'|p'\rangle$ 当成了 x' 的函数（也就是说，这里我们计算的是 $|p'\rangle$ 在坐标表象发下的波函数）。为了求得归一化系数 N，我们考虑：

$$\langle x'|x''\rangle = \int dp'\langle x'|p'\rangle\langle p'|x'\rangle = |N|^2\int dp'\exp\left[\frac{ip'(x'-x'')}{\hbar}\right] = 2\pi\hbar|NN|^2\delta(x'-x'')$$

因此我们有：

$$\langle x'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right)$$

因此，现在我们就可以给出坐标表象下的波函数和动量表象下的波函数之间的关系了：

$$\psi_\alpha(x') = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right]\int dp' \exp\left(\frac{ip'x'}{\hbar}\right)\phi_\alpha(p')$$

$$\phi_\alpha(p') = \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\right]\int dx' \exp\left(-\frac{ip'x'}{\hbar}\right)\psi_\alpha(x')$$

因此，$\psi_\alpha(x')$ 和 $\phi_\alpha(p')$ 是一对傅里叶变换对。

我们接下来考虑一种十分特殊的波函数：高斯波包。此时，坐标表象下的波函数为：

$$\langle x'|\alpha\rangle = \left[\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{d}}\right]\exp\left[ikx' - \frac{x'^2}{2d^2}\right]$$

这个时候，粒子在 x 方向上的概率密度服从高斯分布。我们计算一下粒子此时位置的期望和方差：

$$\langle x\rangle = \int dx'\langle\alpha|x'\rangle x'\langle x'|\alpha\rangle = \int dx'|\langle x'|\alpha\rangle|^2 x' = 0$$

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle &= \int dx' x'^2|\langle x'|\alpha\rangle|^2\\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}d}\right)\int dx' x'^2\exp\left(-\frac{x'^2}{d^2}\right)\\ &= \frac{d^2}{2}\end{aligned}$$

因此：

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \frac{d^2}{2}$$

此外，还可以计算此时动量的均值和方差：

$$\langle p\rangle = \hbar k \quad \langle p^2\rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2} + \hbar^2k^2 \quad \langle(\Delta p)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{2d^2}$$

我们惊奇地发现：高斯波包恰好满足不确定性关系的取等条件：

$$\langle(\Delta x)^2\rangle\langle(\Delta p)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

我们可以利用之前的傅里叶变换给出动量表象下的波函数：

$$\langle p'|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}}\exp\left(-\frac{(p-\hbar k)^2 d^2}{2\hbar^2}\right)$$

不难发现，在动量表象下，粒子分布的概率密度也服从高斯分布，并且，动量表象和坐标表象下的高斯分布的宽度（方差）成反比。

最后我们说明，我们做的所有事情都可以被拓展到三维上，这里列出最重要的两个关系：

$$\langle\beta|P|\alpha\rangle = \int d^3x'\psi_\beta^\star(x')(-i\hbar\nabla')\psi_\alpha(x')$$

以及：

$$\langle x'|p'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\exp\left(\frac{ip'\cdot x'}{\hbar}\right)$$