3.8 连续谱，坐标与动量表象

前面的量子力学形式理论以离散谱形式给出, 即假设本征值是离散的。实际上力学量的本征值也可以是连续的实数，称为**连续谱**。这里我们结合坐标表象和动量表象给出连续谱下的量子力学形式。

考虑位置算符$\hat{x}$. 其本征方程为

$$\hat{x}|x'\rangle = x'|x'\rangle \tag{3.170}$$

x'是本征值，为连续实数。$|x'\rangle$是属于这个本征值的本征矢。

连续谱本征矢满足的正交归一性为

$$\langle x'|x''\rangle = \delta(x' - x'') \tag{3.171}$$

这里dirac函数取代了delta 函数。

自然，以$|x'\rangle$为基矢的表象是坐标（或位置）表象。并且，因为x'的取值从负无穷到正无穷连续变换，Hilbert空间是无穷维的！

这组基矢满足完备性关系

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x'\rangle\langle x'|\mathrm{d}x' = 1 \tag{3.172}$$

有了完备性关系, 任意态矢$|\alpha\rangle$都可以展开成基矢的叠加(当然，在我们关心粒子的空间运动的时候）

$$|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}x'|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}x'\psi_\alpha(x')|x'\rangle \tag{3.173}$$

这里我们定义了

$$\psi_\alpha(x') \equiv \langle x'|\alpha\rangle \tag{3.174}$$

就是我们熟悉的**波函数**。本质上，它是列矢的元素，但由于x'连续，我们并不这么写。

根据测量原理，测量位置应该得到x的本征值x'. 假设我们设置一个探测口径无穷小的探测器：粒子来到位置x'时，它会发出‘滴答’声. 之后粒子的态变成’$|x'\rangle$’. 这类似于自旋状态在粒子通过SG装置后变成$|S_z,+\rangle$或者$|S_z,-\rangle$.

但是现实中，最好的探测器也有个口径(或者分辨率)Δ, 会在粒子落入一定范围$(x'-\Delta/2, x'+\Delta/2)$时，发出’滴答‘声. 那么测量之后的状态是怎样的呢? 它’塌缩‘为

$$|\alpha\rangle \overset{measurement}{\longrightarrow} \int_{x'-\Delta/2}^{x'+\Delta/2} \mathrm{d}x''|x''\rangle\psi_\alpha(x'') \tag{3.175}$$

假设在Δ这个尺寸下$\psi_\alpha(x)$基本不变，那么听见滴答声的几率就是$|\psi_\alpha(x')|^2\Delta$, 通常写为$|\psi_\alpha(x')|^2dx'$. 这正是我们最早给出的波函数的几率解释, $|\psi_\alpha(x')|^2$是对应的几率密度.

我们要求$|\alpha\rangle$归一，即$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$, 则

$$\int \mathrm{d}x'\langle\alpha|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}x'\psi^*_\alpha(x')\psi_\alpha(x') = 1 \tag{3.176}$$

就是我们熟悉的波函数的归一化。

我们可以把以上讨论推广到三维空间. 基矢为$|\mathbf{x}'\rangle$, 是完备的。

$$|\alpha\rangle = \int d^3x'|\mathbf{x}'\rangle\langle\mathbf{x}'|\alpha\rangle \tag{3.177}$$

其中

$$|\mathbf{x}'\rangle \equiv |x', y', z'\rangle \tag{3.178}$$

是力学量x, y, z的共同本征态（共同本征态这个概念我们以后会详细讨论), 满足

$$x|\mathbf{x}'\rangle = x'|\mathbf{x}'\rangle, \quad y|\mathbf{y}'\rangle = y'|\mathbf{y}'\rangle, \quad z|\mathbf{z}'\rangle = z'|\mathbf{z}'\rangle \tag{3.179}$$

动量的情况类似。记其算符为$\hat{p}$. 其本征方程为

$$\hat{p}|p'\rangle = p'|p'\rangle \tag{3.180}$$

p'是本征值，为连续实数。$|p'\rangle$是属于这个本征值的本征矢。正交归一性

$$\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'') \tag{3.181}$$

同样满足完备性关系

$$\int |p'\rangle\langle p'|\mathrm{d}p' = 1 \tag{3.182}$$

以$|p'\rangle$为基矢的表象就是动量表象。

因此任意态矢$|\alpha\rangle$都可以展开

$$|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}p'|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}p'\varphi_\alpha(p')|p'\rangle \tag{3.183}$$

$\varphi_\alpha(p') \equiv \langle p'|\alpha\rangle$就是我们熟悉的动量表象波函数。

根据测量原理，测量位置得到$p' \in (p'-\mathrm{d}p'/2, p'+\mathrm{d}p'/2)$的几率是$|\varphi_\alpha(p')|^2\mathrm{d}p'$.

对一个归一化态矢量$\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$, 则

$$\int \mathrm{d}p'\langle\alpha|p'\rangle\langle p'|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}p'\varphi_\alpha^*(p')\varphi_\alpha(p') = 1 \tag{3.184}$$

就是动量波函数的归一化。

3.8.1 坐标表象下算符的表示

现在的问题是$\hat{x},\hat{p}$的'矩阵'怎么写?

按前面的定义，我们似乎应该写出矩阵元

$$\langle x_1|\hat{x}|x_2\rangle = \langle x_1|x_2|x_2\rangle = x_2\delta(x_1-x_2) \tag{3.185}$$

但实际上这不方便，很笨拙。

我们考虑$\hat{x}$作用到任意态矢$|\alpha\rangle$得到另一个态矢$|\beta\rangle$:

$$\hat{x}|\alpha\rangle = |\beta\rangle \tag{3.186}$$

看波函数:

$$\langle x|\hat{x}|\alpha\rangle = \langle x|\beta\rangle = \psi_\beta(x) \tag{3.187}$$

由于

$$\langle x|\hat{x}|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}x'\langle x|\hat{x}|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}x' x'\psi_\alpha(x')\langle x|x'\rangle = x\psi_\alpha(x) \tag{3.188}$$

效果就是

$$x\psi_\alpha(x) = \psi_\beta(x) \tag{3.189}$$

$\hat{x}$把$|\alpha\rangle$转动为$|\beta\rangle$, 对应于x把波函数$\psi_\alpha(x)$变成了$\psi_\beta(x)$. 可以看到x是$\hat{x}$的'有效'算符，也就是通常意义上的坐标算符。

那么动量算符$\hat{p}$的表达式, 或者说它的"有效"算符是什么呢?

我们可以承认对易关系$[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ (作为公理), 利用(3.189)直接算出

$$\hat{p}\psi(x) = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) \tag{3.190}$$

得到通常意义上的动量算符$\hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.

过程：考虑任意状态$|\alpha\rangle$

$$[\hat{x},\hat{p}]|\alpha\rangle = i\hbar|\alpha\rangle \tag{3.191}$$

$$\langle x|(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})|\alpha\rangle = i\hbar\langle x|\alpha\rangle = i\hbar\psi_\alpha(x)$$

$$x\langle x|\hat{p}|\alpha\rangle - \langle x|\hat{p}\hat{x}|\alpha\rangle = i\hbar\psi_\alpha(x) \tag{3.192}$$

假设$\hat{p}|\alpha\rangle=|\beta\rangle$. 我们寻找一个"有效"算符$\hat{\hat{p}}$, 满足$\langle x|\hat{p}|\alpha\rangle = \hat{\hat{p}}\langle x|\alpha\rangle = \hat{\hat{p}}\psi_\alpha(x) = \psi_\beta(x)$. 那么

$$\langle x|\hat{p}\hat{x}|\alpha\rangle = \hat{\hat{p}}\langle x|\hat{x}|\alpha\rangle = \hat{\hat{p}}(x\psi_\alpha(x)) = (\hat{\hat{p}}x)\psi_\alpha(x) + x\hat{\hat{p}}\psi_\alpha(x)$$

代入（3.192）, 有

$$x\hat{\hat{p}}\psi_\alpha(x) - (\hat{\hat{p}}x)\psi_\alpha(x) - x\hat{\hat{p}}\psi_\alpha(x) = i\hbar\psi_\alpha(x) \tag{3.193}$$

这要求

$$\hat{\hat{p}}x = i\hbar \tag{3.194}$$

满足这一关系的微分算符就是$\hat{\hat{p}}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. $\hat{\hat{p}}$通常也写作$\hat{p}$, 但是注意它是作用在态矢量对应的波函数上的.

另外一个导出动量算符表达式的方式是利用

$$\langle x|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'x/\hbar} \tag{3.195}$$

即动量本征态的波函数是平面波形式, 也就是德布罗意关系.

这个函数可以保证动量基矢的连续谱归一化

$$\langle p|p'\rangle = \int \mathrm{d}x\langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle = \int \mathrm{d}x\frac{1}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'-p)x/\hbar} = \delta(p-p') \tag{3.196}$$

这也是为什么对不可归一化的平面波要选取这样的系数的原因。

再假设动量算符$\hat{p}$作用到$|\alpha\rangle$得到$|\beta\rangle$，即

$$\hat{p}|\alpha\rangle = |\beta\rangle \tag{3.197}$$

$$\hat{p}|\alpha\rangle = \int \hat{p}|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle\mathrm{d}x' = \int \mathrm{d}x'|x'\rangle\langle x'|\beta\rangle \tag{3.198}$$

以$\langle x|$跟上式作内积

$$\langle x|\hat{p}|\alpha\rangle = \int\langle x|\hat{p}|x'\rangle\langle x'|\alpha\rangle\mathrm{d}x' = \psi_\beta(x) \tag{3.199}$$

现在的关键是'矩阵元' $\langle x|\hat{p}|x'\rangle = ?$

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = \int \mathrm{d}p_1\mathrm{d}p_2\langle x|p_1\rangle\langle p_1|\hat{p}|p_2\rangle\langle p_2|x'\rangle = \int\langle x|p_1\rangle\langle p_1|x'\rangle p_1\mathrm{d}p_1 \tag{3.200}$$

利用(3.195), 导出

$$\langle x|\hat{p}|x'\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\int \mathrm{d}p_1\langle x|p_1\rangle\langle p_1|x'\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-x') \tag{3.201}$$

带回(3.199),

$$\langle x|\hat{p}|\alpha\rangle = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\int\delta(x-x')\psi_\alpha(x')\mathrm{d}x' = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_\alpha(x) = \psi_\beta(x) \tag{3.202}$$

根据$\hat{p}$的效果：把$\psi_\alpha(x)$变成$\psi_\beta(x)$, 我们知道$\hat{p}$的表示就是$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.

任意一个算符$F(x,p)$, 如果$F|\alpha\rangle = |\beta\rangle$, 即

$$\langle x|F|\alpha\rangle = \langle x|\beta\rangle = \psi_\beta(x), \tag{3.203}$$

都可以找到$\psi_\alpha(x)$和$\psi_\beta(x)$的如下关系

$$\hat{F}\psi_\alpha(x) = F(x,-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi_\alpha(x) = \psi_\beta(x) \tag{3.204}$$

即其算符在坐标表象下的'有效算符'为$\hat{F} = F(x,-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x})$.

3.8.2 坐标表象下的Schrödinger 方程

下面我们根据一般的Schrödinger 方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\alpha\rangle = H|\alpha\rangle \tag{3.205}$$

推导出坐标表象下的波函数的薛定鄂方程.

作内积

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle x|\alpha\rangle = \langle x|H|\alpha\rangle \tag{3.206}$$

引入"有效"算符$\hat{H}$, 满足$\langle x|H|\alpha\rangle = \hat{H}\psi_\alpha(x,t)$, 其中$\hat{H} = H(x,-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})$.

因此

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_\alpha(x,t) = H(x,-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi_\alpha(x,t) = (\frac{-\hbar^2\partial^2}{2m\partial x^2}+V(x))\psi_\alpha(x,t) \tag{3.207}$$

3.8.3 动量表象

自然，在动量表象下假设

$$\hat{p}|\alpha\rangle = |\beta\rangle \tag{3.208}$$

可以得到

$$\langle p|\hat{p}|\alpha\rangle = p\varphi_\alpha(p) = \varphi_\beta(p) \tag{3.209}$$

即有效算符$\hat{p} = p$. 由

$$\langle p|\hat{x}|\alpha\rangle = \langle p|\beta\rangle \tag{3.210}$$

根据$\langle p|$的平面波形式，容易发现

$$\langle p|\hat{x}|\alpha\rangle = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}\varphi_\alpha(p) = \varphi_\beta(p) \tag{3.211}$$

即有效算符$\hat{x} = \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p}$.

3.8.4 坐标表象和动量表象的变换

从动量波函数计算坐标波函数：

$$\psi_\alpha(x) = \langle x|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}p\langle x|p\rangle\langle p|\alpha\rangle = \int \varphi_\alpha(p)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}px/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{d}p \tag{3.212}$$

$\langle x|p\rangle$起到从动量到坐标表象的变换矩阵S_{xp}的作用. 这就是我们熟悉的付立叶变换.

从坐标波函数计算动量波函数：

$$\varphi_\alpha(p) = \langle p|\alpha\rangle = \int \mathrm{d}x\langle p|x\rangle\langle x|\alpha\rangle = \int \psi_\alpha(x)\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}px/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\mathrm{d}x \tag{3.213}$$

$\langle p|x\rangle$起到从动量到坐标表象的变换的逆变换矩阵$S^\dagger_{px}$的作用. 这就是我们熟悉的付立叶变换的逆变换.

3.8.5 内积

容易证明内积可以通过波函数的积分得到

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \int \mathrm{d}x\langle\alpha|x\rangle\langle x|\beta\rangle = \int \psi^*_\alpha(x)\psi_\beta(x)\mathrm{d}x \equiv (\psi_\alpha, \psi_\beta) \tag{3.214}$$

$(\psi_\alpha, \psi_\beta)$是内积的另一种记法.

进一步

$$\langle\alpha|Q|\beta\rangle = \int \mathrm{d}x\langle\alpha|x\rangle\langle x|Q|\beta\rangle = \int \mathrm{d}x\psi^*_\alpha(x)Q(x, \hat{p} = i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi_\beta(x) \equiv (\psi_\alpha, \hat{Q}\psi_\beta) \tag{3.215}$$

我们还可以得到算符厄密性的另一种表达.

厄密算符满足

$$\langle\alpha|Q|\beta\rangle = \langle\beta|Q|\alpha\rangle^* \tag{3.216}$$

$$\begin{aligned}\langle\alpha|Q|\beta\rangle &= \int\langle\alpha|Q|x\rangle\langle x|\beta\rangle\mathrm{d}x = \int\langle x|Q|\alpha\rangle^*\psi_\beta(x)\mathrm{d}x = \int(\hat{Q}\psi_\alpha(x))^*\psi_\beta(x)\mathrm{d}x \\ &= (\hat{Q}\psi_\alpha, \psi_\beta)\end{aligned} \tag{3.217}$$

所以

$$(\psi_\alpha, \hat{Q}\psi_\beta) = (\hat{Q}\psi_\alpha, \psi_\beta) \tag{3.218}$$