1.3 力学量的平均值与算符

我们知道一个变量的概率分布即可知道其统计平均值(期望值). 比如, 知道$|\psi(x)|^2$就可以算出粒子位置的期望值:

$$\langle x\rangle = \int |\psi(x)|^2 x dx \tag{1.45}$$

但是$|\psi(x)|^2$不是动量p的概率分布函数，所以

$$\langle p\rangle \neq \int |\psi(x)|^2 p dx. \tag{1.46}$$

动量的期望值应该由下式给出

$$\langle p\rangle = \int |\varphi(p)|^2 p dp = \int \varphi^* \varphi p dp \tag{1.47}$$

由于

$$\varphi(p)^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \int \psi^*(x) e^{+i\frac{p}{\hbar}x} dx$$

于是

$$\langle p\rangle = \int \frac{dpdx}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \psi^*(x) e^{i\frac{p}{\hbar}x} p\varphi(p) \tag{1.48}$$

利用

$$\frac{-i\hbar d}{dx} e^{i\frac{p}{\hbar}x} = p e^{i\frac{p}{\hbar}x} \tag{1.49}$$

得到

$$\langle p\rangle = \int \frac{dpdx}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \psi^*(x) (\frac{-i\hbar d}{dx}) e^{i\frac{p}{\hbar}x} \varphi(p) \tag{1.50}$$

再利用

$$\psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \int \varphi(p) e^{i\frac{p}{\hbar}x} dp$$

得到

$$\langle p\rangle = \int dx \psi^*(x) (\frac{-i\hbar d}{dx}) \psi(x) \tag{1.51}$$

我们定义$-i\hbar\frac{d}{dx}$为动量算符$\hat{p}$. 利用它, 我们可以通过$\psi(x)$直接计算动量的期望值.

回头看Eq.(1.45), 可以改写成

$$\langle x\rangle = \int \psi^* x \psi dx. \tag{1.52}$$

我们称x是坐标算符$\hat{x}$.

推广到三维,

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla, \qquad \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}. \tag{1.53}$$

对应三个方向的动量。

以上动量与坐标算符的形式为坐标表象下的. 根据Eq.(1.47), 我们可以定义$\hat{p} = p$. 在将 Eq.(1.45) 写成

$$\langle x\rangle = \int \varphi(p)^* (\frac{i\hbar d}{dp}) \varphi(p) dp \tag{1.54}$$

形式, 得到$\hat{x} = \frac{i\hbar d}{dp}$. 这样的形式称为动量表象下的坐标与动量算符. 如非特别说明, 以后提到的算符具体形式都是在坐标表象下的.

另外，势能$V(x)$是x的函数, 因此其统计平均

$$\langle V\rangle = \int |\psi(x)|^2 V(x) dx = \int \psi(x)^* \hat{V} \psi(x) dx \tag{1.55}$$

因此, 势能算符$\hat{V}$为$V(x)$.

对于动能$T=\frac{p^2}{2m}$, 知道p就能得到T, 所以其期望值

$$\begin{aligned}\langle T\rangle &= \int|\varphi(p)|^2\frac{p^2}{2m}dp \\ &= \int\psi^*(x)(\frac{-i\hbar d}{dx})(\frac{-i\hbar d}{dx})\frac{\psi(x)}{2m}dx \\ &= \int\psi^*(x)(\frac{-\hbar^2d^2}{2mdx^2})\psi(x)dx,\end{aligned} \tag{1.56}$$

这样我们得到动能算符的具体形式

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2d^2}{2m\mathrm{d}x^2}. \tag{1.57}$$

推广到三维情况

$$\hat{T}=-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} \tag{1.58}$$

下面研究角动量$\mathbf{l}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$. 问题必须在2维或3维空间. 考虑一般情况: 3维空间. 这样角动量有三个分量. 其期望值也就是三个分量的期望值

$$\langle\mathbf{l}\rangle=(\langle l_x\rangle,\langle l_y\rangle,\langle l_z\rangle). \tag{1.59}$$

我们研究z分量. 在直角坐标系下

$$l_z=xp_y-yp_x. \tag{1.60}$$

怎么利用波函数来计算l_z的期望值?

我们这里的目的是给大家一个'感觉'。所以假设x,y,z方向的几率相互独立, 即波函数可以分离变量, 并各自归一化:

$$\psi(x,y,z)=\psi_x(x)\psi_y(y)\psi_z(z) \tag{1.61}$$

$$\int|\psi|^2d^3r=\int|\psi_x|^2dx=\int|\psi_y|^2dy=\int|\psi_z|^2dz=1 \tag{1.62}$$

可以推出:

$$\begin{aligned}\varphi(p_x,p_y,p_z) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\int\psi(x,y,z)e^{-\frac{i}{\hbar}(p_xx+p_yy+p_zz)}dxdydz \\ &= \varphi_x(p_x)\varphi_y(p_y)\varphi_z(p_z),\end{aligned} \tag{1.63}$$

其中

$$\varphi_x(p_x)=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}}\int\psi_x(x)e^{-\frac{i}{\hbar}p_xx}dx \tag{1.64}$$

完全由ψ_x决定. $\varphi_y(p_y),\varphi_z(p_z)$类同. x与p_y, y与p_x的取值没有关联，相互独立。

现在我们问: 粒子在x方向位于x附近，同时具有y方向动量p_y的几率? 根据概率加法定理, 我们知道它位于x附近的几率是

$$dx\int|\psi(x,y,z)|^2dydz=|\psi_x(x)|^2dx, \tag{1.65}$$

它具有动量p_y(不论p_x,p_z为多少)的几率为

$$dp_y\int|\varphi(p_x,p_y,p_z)|^2dp_xdp_y=|\varphi_y(p_y)|^2dp_y \tag{1.66}$$

同时我们注意到这两个事件是独立的, 同时发生的几率就是几率相乘, 因此

$$\begin{aligned}\langle l_z\rangle &= \int x|\psi_x|^2dx\cdot p_y|\varphi_y|^2dp_y-\int y|\psi_y|^2dy\cdot p_x|\varphi_x|^2dp_x \\ &= \int\psi_x^*x\psi_xdx\psi_y^*(-i\hbar\frac{\partial}{\partial y})\psi_ydy-\int\psi_y^*y\psi_ydy\psi_x^*(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi_xdx \\ &= \int\psi^*[-i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})]\psi dxdydz.\end{aligned} \tag{1.67}$$

据此可以定义角动量z分量的算符$\hat{l_z}=-i\hbar(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x})$. 我们看到这一算符可以写成$\hat{x}\hat{p_y}-\hat{y}\hat{p_x}$.

一般地，力学量A如果可以写成坐标与动量的函数$A(x,p)$， 那么其算符可以写为$A(\hat{x},\hat{p})$（表示 函数关系不变, 把x换成$\hat{x}$, p换成$\hat{p}$). 这样该力学量的期望值可以按下式计算

$$\langle A\rangle=\int\psi^*\hat{A}\psi\mathrm{d}\mathbf{r}. \tag{1.68}$$

例如哈密顿量

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(x), \tag{1.69}$$

其算符为

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}+V(x)=\frac{\hat{p}^2}{2m}+V(\hat{x}). \tag{1.70}$$