

我所知道的

(X, P) Operator 及 Representation

林慶良 76級

若古典力學中 $p = m \frac{d}{dt} x$ 在量子論內 $\langle p \rangle =$

$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle$ 仍成立，可證明物理量與算符的對

應： $x \rightarrow x$ 則 $p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ 並且 $p \rightarrow p$ 則 $x \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$

以及 $\psi(x, t)$ 與 $\Phi(p, t)$ 間滿足 Fourier Transformation

引言

物質具有質點與波動的雙重性質已是被接受的事實，企圖只用單一性解釋原子世界終究失敗；量子論不再單一考慮物質的單一性，而用一狀態函數 (State function) 來描述，在量子論內 $|\psi(x, t)|^2$ 表示欲在 $x-x+dx$ 於 t 時發現此質點的機率密度，並且假設

$$H\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)$$

(H 是 Hamiltonian)

和物理每一觀察量 A (observable) 對應一算符 (Operator) A，我們所能知道的期望值 $\langle A \rangle$ 定義為

$$\langle A \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) A \psi(x, t) dx$$

基於此如果能夠把最前式寫成微分方程的型式，所剩下的只是如何解此方程式了。本文所要做的工作是設古典力學內 $p = m \frac{d}{dt} x$ ，在量子論內 $\langle p \rangle$

$= m \frac{d}{dt} \langle x \rangle$ 仍成立，而由數學演算證明 $x \rightarrow x$

$\Rightarrow p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ 及 $p \rightarrow p \Rightarrow x \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$ ，而在

x-space 內 $\psi(x, t)$ 與在 p-space 內 $\Phi(p, t)$ 之間滿足 Fourier Transformation，即

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dp$$

$$\Phi(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} dx$$

一、 $x \rightarrow x \Rightarrow p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$

$$\therefore \langle x \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx \dots\dots(1)$$

$$\langle p \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) p \psi(x, t) dx \dots\dots(2)$$

由 $\langle p \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle$

$$= m \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx$$

$$= m \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial t} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) \right.$$

$$\left. + \psi^*(x, t) x \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \right] dx \dots(3)$$

$$H \equiv \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (\text{設 } V(x) \text{ real}) \text{ 代入(3)}$$

$$\begin{aligned} \text{得 } \int_{-\infty}^{\infty} & \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[\left(\frac{p^2}{2m} + V(x) \right) \phi^*(x, t) \right] x \phi(x, t) \right. \\ & \left. - \frac{i}{\hbar} \phi^*(x, t) x \left(\frac{p^2}{m} + V(x) \right) \phi(x, t) \right\} dx \\ &= \frac{i}{2m\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} [\phi^*(x, t) p^2 (x\phi(x, t)) \\ & \quad - \phi^*(x, t) x p^2 \phi(x, t)] dx \\ &= \frac{i}{2m\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x, t) [x p^2 \phi(x, t) \\ & \quad + 2(p x) p (\phi(x, t)) + (p^2 x) \phi(x, t) \\ & \quad - x p^2 (\phi(x, t))] dx \\ &= \frac{i}{2m\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x, t) [2(p x) p (\phi(x, t)) \\ & \quad + (p^2 x) \phi(x, t)] dx \dots\dots\dots(4) \end{aligned}$$

$$\text{由(4)=(2)} \quad \therefore 1 = \frac{i}{\hbar} p(x) \text{ 及 } p^2(x) = 0 \dots\dots\dots(5)$$

滿足上二關係，最簡單的取法是 $p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ ，代回

$$\begin{aligned} H\phi &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi \text{ 即成爲} \\ & - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi(x, t) + V(x)\phi(x, t) \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) \end{aligned}$$

此即 Schrödinger eq

但 $p = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \right)$ 亦滿足此式，所以 p

之取法並非唯一，我們也可取 $p = \frac{\hbar}{i} (e^A - 1)$

($A \equiv \frac{\partial}{\partial x}$, $A^0 = 1$) 然而取更高階對問題之解決只是徒增困難而已。

二、

設 $H\Phi(p, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(p, t)$ 仍然成立。

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p, t) p \Phi(p, t) dp \dots\dots(6)$$

$$\langle P \rangle = m \frac{d}{dt} \langle x \rangle$$

$$\begin{aligned} &= m \frac{d}{dt} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(p, t) x \Phi(p, t) dp \right) \\ &= m \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\partial}{\partial t} \Phi^*(p, t) x (\Phi(p, t)) \right. \\ & \quad \left. + \Phi^* x \frac{\partial}{\partial t} (\Phi(p, t)) \right] dp \\ &= m \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{-i\hbar} \left(\frac{p^2}{2m} \right) \Phi^*(p, t) \right. \\ & \quad \left. x (\Phi(p, t)) + \Phi^*(p, t) \right. \\ & \quad \left. x \left(\frac{1}{i\hbar} \frac{p^2}{m} \Phi(p, t) \right) \right] dp \\ &= \frac{i}{-2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} [\Phi^*(p, t) x (p^2) \\ & \quad \Phi(p, t)] dp \dots\dots\dots(7) \end{aligned}$$

$$\text{由(7)=(6)} \quad \therefore p = -\frac{i}{2\hbar} g(p^2)$$

選擇 $x = i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$ ，如同(一)中 x 之取定也非唯一

三、

在(一)內設

$$H\phi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t)$$

→ x-representation

$$H\Phi(p, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t)$$

→ p-representation

於此討論 $\phi(x, t)$ 與 $\Phi(p, t)$ 之關係。

以 $x \rightarrow x \quad p \rightarrow \frac{\hbar}{i} (e^A - 1)$ 爲例：

$$H\phi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) \text{ 改寫成}$$

$$\begin{aligned} & - \frac{1}{2m} (\hbar^2) (e^A - 1) (e^A - 1) \phi(x, t) \\ & + V(x) \phi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) \end{aligned}$$

$$\text{設 } \phi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp$$

$$\begin{aligned} \text{則 } & - \frac{\hbar^2}{2m} (e^{2A} - 2e^A - 1) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \\ & + V(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \end{aligned}$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \right] \dots\dots\dots(8)$$

設 $V(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{V^{(n)}(0)}{n!} x^n$, 一個 Lemma:

$$\begin{aligned} e^A \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^A \left(e^{\frac{ipx}{\hbar}} \right) dp \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!} \left(e^{\frac{ipx}{\hbar}} \right) dp \quad A^n \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x} \right)^n \\ = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) \left(\frac{ip}{\hbar} \right)^n e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{ip}{\hbar} \right)^n \frac{1}{n!} e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) \left(e^{\frac{ip}{\hbar}} \right) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ip}{\hbar}(1+x)} dp \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{故 } e^{2A} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ip}{\hbar}(2+x)} dp \\ \mathcal{L} x^n \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n \left(e^{\frac{ipx}{\hbar}} \right) dp \\ = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^n \left(\frac{\partial}{\partial p} \right)^n \left(\Phi(p, t) \right) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \end{aligned}$$

作 n 次部份積分

(8)式改寫為:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ip}{\hbar}(2+x)} dp \right. \\ \left. - 2 \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ip}{\hbar}(1+x)} dp \right. \\ \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \right. \\ \left. + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{V^{(n)}(0)}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\hbar}{i} \right)^n \left(\frac{\partial}{\partial p} \right)^n \Phi(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \right] \\ = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp \end{aligned}$$

$$\text{故 } -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\Phi(p, t) \left(e^{\frac{2ip}{\hbar}} - 2e^{\frac{ip}{\hbar}} - 1 \right) \right]$$

$$\begin{aligned} + V \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \Phi(p, t) \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(p, t) - \frac{\hbar^2}{2m} \left(e^{\frac{ip}{\hbar}} - 1 \right)^2 \Phi(p, t) \\ + V \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \Phi(p, t) \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(p, t) \dots\dots\dots(9) \end{aligned}$$

此式已不是 p-representation 之 Schrodinger

(如果取 $p \rightarrow p$, $x \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$) , 除非 Hamiltonian

之動能型式改為 $-\frac{[\hbar(e^{\frac{ip}{\hbar}} - 1)]^2}{2m}$, 此時

$$H\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) \text{ 與 } H\Phi(p, t)$$

$$= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi, \text{ 而 } \psi(x, t) \text{ 與 } \Phi(p, t) \text{ 才滿足}$$

Fourier Transformation pair relation 但是如果

$$x \rightarrow x, p \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \text{ (不用 } \frac{\hbar}{i} (e^A - 1) \text{)}, (9) \text{ 式}$$

變為

$$\begin{aligned} \frac{p^2}{2m} \Phi(p, t) + V \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial p} \right) \Phi(p, t) \\ = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(p, t) \end{aligned}$$

此即 p-representation 之 Schrodinger 因為

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) e^{\frac{ipx}{\hbar}} dp$$

.....(10)

$$\text{以 } \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ip'x}{\hbar}} \text{ 乘 (10) 式兩邊}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) e^{-\frac{ip'x}{\hbar}} dx \\ = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{1}{\hbar}(p-p')x} dx dp \\ = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(p, t) \delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) dp = \Phi(p', t) \end{aligned}$$

$$\text{所以 } H\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t)$$

$$H\Phi(p, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(p, t)$$

加上 Complementary Principle P-operator 之微分型式便不可任意取了。