中心力场问题–
三维各向同性谐振子

三维各向同性谐振子

三维各向同性谐振子的势能函数：

$$V(r)=\frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2=\frac{1}{2}\mu\omega^2\left(x^2+y^2+z^2\right)$$

哈密顿量可写为：

$$H=\sum_i H_i,\quad H_i=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\partial_i^2+\frac{1}{2}m\omega^2 r_i^2,\quad (i=x,y,z)$$

类似多粒子系统，系统波函数分离变量为

$$\psi=\psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)$$

其中 ψ_n 为一维谐振子与量子数n对应的本征函数

$$2T = \overline{r\cdot\nabla V} = 2\overline{V}$$

系统能级为

$$E=\left(n_x+\frac{1}{2}+n_y+\frac{1}{2}+n_z+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega$$

或

$$E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega,\quad \left(N=n_x+n_y+n_z\right)$$

另外，位力定理仍成立：$\overline{T}=\overline{V}=\dfrac{E}{2}$

回顾一维情况下谐振子波函数的表达式：

$$\psi_0 = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

$$\psi_1 = \frac{\sqrt{2\alpha}}{\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2 x^2/2} \alpha x$$

$$\psi_2 = \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2}\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2 x^2/2} \left(2\alpha^2 x^2 - 1\right)$$

$$\vdots$$

在球坐标系中，定态薛定鄂方程的径向部分：

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right)\right]R=0$$

若令

$$R(r)=\frac{u(r)}{r}$$

则有

$$\left[\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E-\frac{1}{2}\mu\omega^2r^2-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}\right)\right]u=0$$

在 $l=0$ 时，可以看到u的方程和一维谐振子方程非常相像，但是又有本质不同：u(r)的自变量定义在0<r<∞范围内，而一维谐振子范围是-∞<x<∞，这直接导致了它们的基态能量也不相同

引入无量纲常量ρ、λ：

$$\rho = \alpha r, \quad \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

方程变为：

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left[\lambda - \rho^2 - \frac{l(l+1)\hbar^2}{\rho^2}\right]R = 0$$

根据前面课程的讨论，在 $\rho \to 0$ 时 $R(\rho) \to \rho^l$ 。在 $\rho \to \infty$ 时方程变为

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} - \rho^2 R = 0$$

解为 $R(\rho) \propto e^{\pm\rho^2/2}$，但根据波函数有限性只能取 $R(\rho) \propto e^{-\rho^2/2}$

得到渐近形式后可设

$$R(\rho)=v(\rho)\rho^{l}e^{-\rho^{2}/2}$$

代入原方程后得

$$\frac{d^{2}v}{d\rho^{2}}+\frac{2}{\rho}\left(l+1-\rho^{2}\right)\frac{dv}{d\rho}+\left(\lambda-2l-3\right)v=0$$

再做变量代换 $\xi=\rho^{2}$ 得

$$\frac{d^{2}v}{d\xi^{2}}+\left(\frac{2l+3}{2\xi}-1\right)\frac{dv}{d\xi}+\frac{\lambda-2l-3}{4\xi}v=0$$

这又是合流超几何方程。和氢原子的合流超几何方程做对比

$$\frac{d^{2}v}{d\rho^{2}}+\left[\frac{2\left(l+1\right)}{\rho}-1\right]\frac{dv}{d\rho}+\frac{\beta-\left(l+1\right)}{\rho}v=0$$

类似于氢原子方程有解条件

$$n_r = \beta - (l + 1) = 0, 1, 2, \cdots$$

当前方程的有解条件为

$$n_r = \frac{\lambda - 2l - 3}{4} = 0, 1, 2, \cdots$$

或者

$$\lambda = 2N + 3, \quad (N = 2n_r + l = l, l + 2, l + 4 \cdots)$$

代入λ表达式

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

得量子化的能量

$$\boxed{E_N = \left(N + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad (N = 0, 1, 2, \cdots)}$$

在N给定以后，l可以取值

$$l = N,\ N-2,\ N-4, \cdots, \begin{cases} 0, & (N \ \text{even}) \\ 1, & (N \ \text{odd}) \end{cases}$$

求证：与量子数N对应的能级简并度为

$$\frac{(N+1)(N+2)}{2}$$

这与直角坐标下能级简并度是一样的

最后系统径向波函数为

$$R(r) = C\, L_{n_r}^{l+(1/2)}(\rho^2)\, \rho^l\, e^{-\rho^2/2}, \quad \left(\rho = \sqrt{\mu\omega/\hbar}\, r\right)$$

其中 $L_{n_r}^{l+(1/2)}$ 是以 ρ^2 为自变量的缔合Laguerre多项式，C是归一化常数

C的取值通过下面积分定出：

$$\int_0^\infty \left[R_{n_r l}\right]^2 r^2 dr = 1, \quad \left(N = 2n_r + l\right)$$

$n_r = 0,1$ 时的径向波函数为

$$R_{0l} = \alpha^{3/2}\left[\frac{2^{l+2}}{\sqrt{\pi}\,(2l+1)!!}\right]^{1/2} (\alpha r)^l e^{-\alpha^2 r^2/2},$$

$$R_{1l} = \alpha^{3/2}\left[\frac{2^{l+3}}{\sqrt{\pi}\,(2l+3)!!}\right]^{1/2} (\alpha r)^l e^{-\alpha^2 r^2/2}\left(l + \frac{3}{2} - \alpha^2 r^2\right)$$

其中

$$n!! \equiv n(n-2)(n-4)\cdots$$

实质上说，对于同一个N，直角坐标系中的的波函数 $\psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)$ 和球坐标系中的波函数 $R_{Nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)$ (不同守恒量完全集的本征态)可以通过线性幺正变换互相联系，这是表象变换的一个实际例子

对于N=0来说，在球坐标系中（角标为 n_r, l, m）：

$$\psi_{000} = \frac{2\alpha^{3/2}}{\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2 r^2/2} Y_{00}(\theta,\varphi)$$

$$= \frac{\alpha^{3/2}}{\pi^{3/4}} e^{-\alpha^2 r^2/2}$$

在直角坐标系中（角标为 n_x, n_y, n_z）：

$$\Phi_{000} = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2 x^2/2} \cdot \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2 y^2/2} \cdot \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} e^{-\alpha^2 z^2/2}$$

$$= \psi_{000}$$

也就是说，ψ_{000} 和 Φ_{000} 之间的幺正变换为1

对于N=1来说，在球坐标系中 $n_r=0, l=1$，所以波函数是三重简并（m=0, ±1）：

$$\psi_{0lm}=\sqrt{\frac{8}{3}}\frac{\alpha^{5/2}}{\pi^{1/4}}e^{-\alpha^2r^2/2}rY_{lm}(\theta,\varphi)$$

$$\begin{pmatrix}\psi_{011}\\ \psi_{010}\\ \psi_{01-1}\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{2}\alpha^{5/2}}{\pi^{3/4}}e^{-\alpha^2r^2/2}\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}r\sin\theta e^{i\varphi}\\ r\cos\theta\\ \frac{1}{\sqrt{2}}r\sin\theta e^{-i\varphi}\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{2}\alpha^{5/2}}{\pi^{3/4}}e^{-\alpha^2r^2/2}\begin{pmatrix}-\frac{1}{\sqrt{2}}(x+iy)\\ z\\ \frac{1}{\sqrt{2}}(x-iy)\end{pmatrix}$$

在直角坐标系中：

$$\begin{pmatrix}\Phi_{100}\\ \Phi_{010}\\ \Phi_{001}\end{pmatrix}=\frac{\sqrt{2}\alpha^{5/2}}{\pi^{3/4}}e^{-\alpha^2r^2/2}\begin{pmatrix}x\\ y\\ z\end{pmatrix}$$

于是就找到了两个波函数之间的幺正变换矩阵：

$$\begin{pmatrix} \psi_{011} \\ \psi_{010} \\ \psi_{01-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_{100} \\ \Phi_{010} \\ \Phi_{001} \end{pmatrix}$$

问：不谈系统对称性的情况下，哈密顿算符也要进行幺正变换才能使量子力学不变。显然在各自的表象中，哈密顿矩阵都是对角化的。那么，在直角坐标系本征函数表象中，球坐标表象的哈密顿矩阵如何表示（N=1）？反过来呢？

在球坐标系本征函数表象中：

$$(H)=\frac{5}{2}\hbar\omega\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

基底为 $(\psi_{011},\psi_{010},\psi_{01-1})$，归一化的本征向量分别为

$$\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},\quad\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},\quad\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

按照前面矩阵力学的幺正变换步骤，我们把旧基底用新基底展开

$$\overbrace{\begin{pmatrix} \psi_{011} & \psi_{010} & \psi_{01-1} \end{pmatrix}}^{\text{旧基底}} = \overbrace{\begin{pmatrix} \Phi_{100} & \Phi_{010} & \Phi_{001} \end{pmatrix}}^{\text{新基底}} \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

所以幺正变换矩阵S为

$$S = \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

态矢量的变换规则是

$$\psi \rightarrow \psi' = S\psi$$

于是在新基底下三个本征态矢变为

$$\begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\1\\0\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$$

即

$$\begin{pmatrix}-1/\sqrt{2}\\-i/\sqrt{2}\\0\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix},\ \begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\-i/\sqrt{2}\\0\end{pmatrix}$$

算符矩阵的变换规则是

$$F \to F' = SFS^{-1} = SFS^{+}$$

于是

$$H' = SHS^{+} = \frac{5}{2}\hbar\omega\begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{5}{2}\hbar\omega\begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{5}{2}\hbar\omega\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

这是一个特殊结果，即单位矩阵经幺正变换后仍为单位矩阵。这是哈密顿矩阵简并时的特殊情况

问：在球坐标系本征函数表象中，$\hat{L}_z$ 的矩阵表示为

$$(L_z)=\hbar\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

在直角坐标系表象中 $\hat{L}_z$ 该如何表示？

$$L_z' = SL_zS^+ = \hbar\begin{pmatrix}-1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2}\\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2}\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0\\ 0 & 0 & 1\\ 1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0\end{pmatrix}$$

$$=\hbar\begin{pmatrix}-1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2}\\ -i/\sqrt{2} & 0 & -i/\sqrt{2}\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-1/\sqrt{2} & i/\sqrt{2} & 0\\ 0 & 0 & 0\\ -1/\sqrt{2} & -i/\sqrt{2} & 0\end{pmatrix}$$

$$
= \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}
$$

检查：新基底下的本征矢确实是$\hat{L}_z$的本征矢量

$$
(L_z)\begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} -1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (L_z)\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (L_z)\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix} = -\hbar \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -i/\sqrt{2} \\ 0 \end{pmatrix}
$$