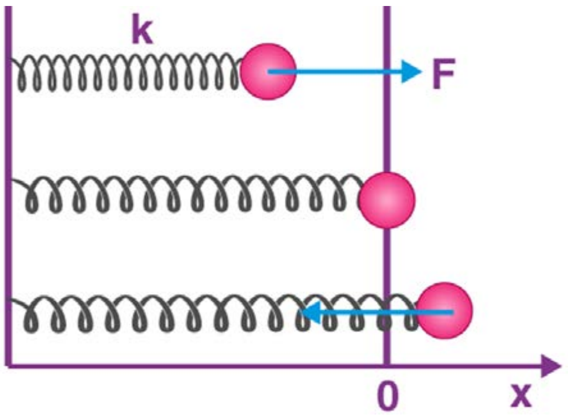
# 第三章 基本应用一

# 3.1 一维谐振子




- 经典力学中描写一维谐振子的Hamiltonian为

$$H=\frac{1}{2m}p^2+\frac{1}{2}m\omega^2q^2$$

其中$m$为振子的质量，$\omega$为振动的频率，

$q$是坐标，$p$是相应的共轭动量

- 最简单的例子就是一个固定在弹性系数为$k$的弹簧上的质量为$m$的小球，弹簧形变和小球所受到的作用力满足Hooke定律，因此，其运动方程为

$$F=-kx=m\frac{d^2x}{dt^2}$$

势能为 $V(x)=\frac{1}{2}kx^2=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，其中 $\omega=\sqrt{k/m}$

- 我们采用正则量子化得到量子力学中一维谐振子的Hamiltonian 为

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2$$

其中$\hat{q}$和$\hat{p}$满足正则量子化条件 $[\hat{q},\hat{p}]=i\hbar$

# 3.1 一维谐振子

❖ 我们可以通过在坐标表象求解如下定态Schrödinger 方程来得到Hamiltonian的本征态

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2)\psi(x)=E\psi(x)$$

❖ 我们下面采用代数方法

➢ 我们定义算符 $\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(i\hat{p}+m\omega\hat{q})$

其厄米共轭为 $\hat{a}^\dagger=\frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(-i\hat{p}+m\omega\hat{q})$

➢ 利用 $[\hat{q},\hat{p}]=i\hbar$，我们有 $[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1$

$$\begin{aligned}[\hat{a},\hat{a}^\dagger]&=\frac{1}{2m\hbar\omega}[i\hat{p}+m\omega\hat{q},-i\hat{p}+m\omega\hat{q}]\\&=\frac{1}{2m\hbar\omega}(im\omega[\hat{p},\hat{q}]-im\omega[\hat{q},\hat{p}])\\&=\frac{i}{\hbar}[\hat{p},\hat{q}]=1\end{aligned}$$

➢ 根据 $\hat{a}$和$\hat{a}^\dagger$的定义，有

$$\hat{p}=i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger-\hat{a})$$

$$\hat{q}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger+\hat{a})$$

代入

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{q}^2$$

我们有

$$\hat{H}=\hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2})$$

# 3.1 一维谐振子

- 利用 $[\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1$，我们有 $[\hat{a},\hat{H}]=\hbar\omega\hat{a}$， $[\hat{a}^\dagger,\hat{H}]=-\hbar\omega\hat{a}^\dagger$

$$\boxed{[\hat{a},\hat{H}]=\hbar\omega[\hat{a},\hat{a}^\dagger\hat{a}]=\hbar\omega[\hat{a},\hat{a}^\dagger]\hat{a}+\hbar\omega\hat{a}^\dagger[\hat{a},\hat{a}]=\hbar\omega\hat{a}}$$

$$\boxed{\hat{H}=\hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2})}$$

- 假定 $|\lambda\rangle$ 是 $\hat{H}$ 的一个本征态，相应的本征值为 $\lambda\hbar\omega$，我们有

$$\hat{H}|\lambda\rangle=\lambda\hbar\omega|\lambda\rangle$$

- 因此， $\hbar\omega\langle\lambda|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\lambda\rangle=\langle\lambda|\hat{H}-\frac{1}{2}\hbar\omega|\lambda\rangle=(\lambda-\frac{1}{2})\hbar\omega$

- 因为 $\langle\lambda|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\lambda\rangle$ 是右矢 $\hat{a}|\lambda\rangle$ 的模平方，所以 $\langle\lambda|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\lambda\rangle\geq 0$，其中等号只有在 $\hat{a}|\lambda\rangle=0$ 时成立，此时 $\lambda=1/2$。因此，$\lambda\geq\frac{1}{2}$。

- 利用 $[\hat{a},\hat{H}]=\hbar\omega\hat{a}$ 和 $[\hat{a}^\dagger,\hat{H}]=-\hbar\omega\hat{a}^\dagger$，我们有

$$\hat{H}\hat{a}|\lambda\rangle=(\hat{a}\hat{H}-\hbar\omega\hat{a})|\lambda\rangle=(\lambda-1)\hbar\omega\hat{a}|\lambda\rangle$$

$$\hat{H}\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle=(\hat{a}^\dagger\hat{H}+\hbar\omega\hat{a}^\dagger)|\lambda\rangle=(\lambda+1)\hbar\omega\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle$$

# 3.1 一维谐振子

- 如果 $\hat{a}|\lambda\rangle \neq 0$，则 $\hat{a}|\lambda\rangle$是 $\hat{H}$ 的对应于本征值 $(\lambda-1)\hbar\omega$ 的本征态。

  因而，我们可以得到本征值序列：

$$\hat{H}\hat{a}|\lambda\rangle = (\lambda-1)\hbar\omega\hat{a}|\lambda\rangle$$
$$\hat{H}\hat{a}^{\dagger}|\lambda\rangle = (\lambda+1)\hbar\omega\hat{a}^{\dagger}|\lambda\rangle$$

$$\hbar\omega\{\lambda, \lambda-1, \lambda-2, \cdots\}$$

  - 存在一个最小的 $\lambda_{min}$ 满足 $\hat{a}|\lambda_{min}\rangle = 0$，此时 $\hat{H}|\lambda_{min}\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|\lambda_{min}\rangle$

    因此，$\lambda$ 序列的最小值为 $\frac{1}{2}$。

- 类似地，可以证明 $\hat{a}^{\dagger}|\lambda\rangle$是 $\hat{H}$ 的对应于本征值 $(\lambda+1)\hbar\omega$ 的本征态。

  （是否存在 $\lambda_{max}$ 满足 $\hat{a}^{\dagger}|\lambda_{max}\rangle = 0$？）

- 因此，$\hat{H}$的本征值为

$$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \cdots$$

- 我们称 $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^{\dagger}$ 为梯子算符，$\hat{a}$ 称为下降算符（或消灭算符），$\hat{a}^{\dagger}$ 称为上升算符（或产生算符）

# 3.1 一维谐振子

- $\hat{a}|n\rangle$和$|n-1\rangle$是同一个态，因此我们有 $\hat{a}|n\rangle = c|n-1\rangle$，其中 $c$ 是常数
- $|n\rangle$和$|n-1\rangle$都是归一化的，因此 $\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = |c|^2$
- 根据 $\langle n|\hat{H}|n\rangle = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$ 和 $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2})$，我们有

$$\langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n \quad \Rightarrow \quad |c|^2 = n$$

- 取 $c$ 为正实数，我们有

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

- 类似地，可以得到

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$$

- 进一步，我们有

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$$

$$(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle = \sqrt{n!}|n\rangle \quad \Rightarrow \quad |n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$$

- ❖ $|n\rangle$是数算符 $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ 的本征态，本征值为 $n$。
- ❖ 以 $\{|n\rangle\}$ 为基矢的Hilbert空间称为Fock空间。

# 3.1 一维谐振子

- 下面计算 $\hat{H}$ 本征态 $|n\rangle$ 在坐标表象下的具体形式，从基态开始讨论，它满足
$$\hat{a}|0\rangle = 0$$
- 在坐标表象中，可以将其写为
$$\langle x|\hat{a}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\langle x|i\hat{p} + m\omega\hat{x}|0\rangle = 0$$
- 利用 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 在坐标表象中的表示，我们有
$$(\frac{d}{dx} + \beta^2 x)\langle x|0\rangle = 0 \qquad \text{其中 } \beta = \sqrt{m\omega/\hbar}$$
- 这个微分方程的解为
$$\langle x|0\rangle = C\exp(-\frac{1}{2}\beta^2 x^2)$$
- 利用归一化条件，可得
$$C = (\frac{\beta}{\sqrt{\pi}})^{1/2}$$

高斯积分公式

$$\int_0^\infty \exp(-\alpha x^2)dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

- 因此，归一化的基态波函数为
$$\psi_0(x) = \langle x|0\rangle = (\frac{\beta}{\sqrt{\pi}})^{1/2}\exp(-\frac{1}{2}\beta^2 x^2) \qquad \text{基态是偶宇称的}$$

# 3.1 一维谐振子

- 利用产生算符 $\hat{a}^\dagger$ 可以得到任意激发态的波函数。在坐标表象下，$\hat{a}^\dagger$ 可以写为

$$\langle x|\hat{a}^\dagger|x'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\frac{1}{\beta}\frac{d}{dx}+\beta x)\delta(x-x')$$

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle}$$

- 因此，第 $n$ 个本征态 $|n\rangle$ 在坐标表象下的表示为

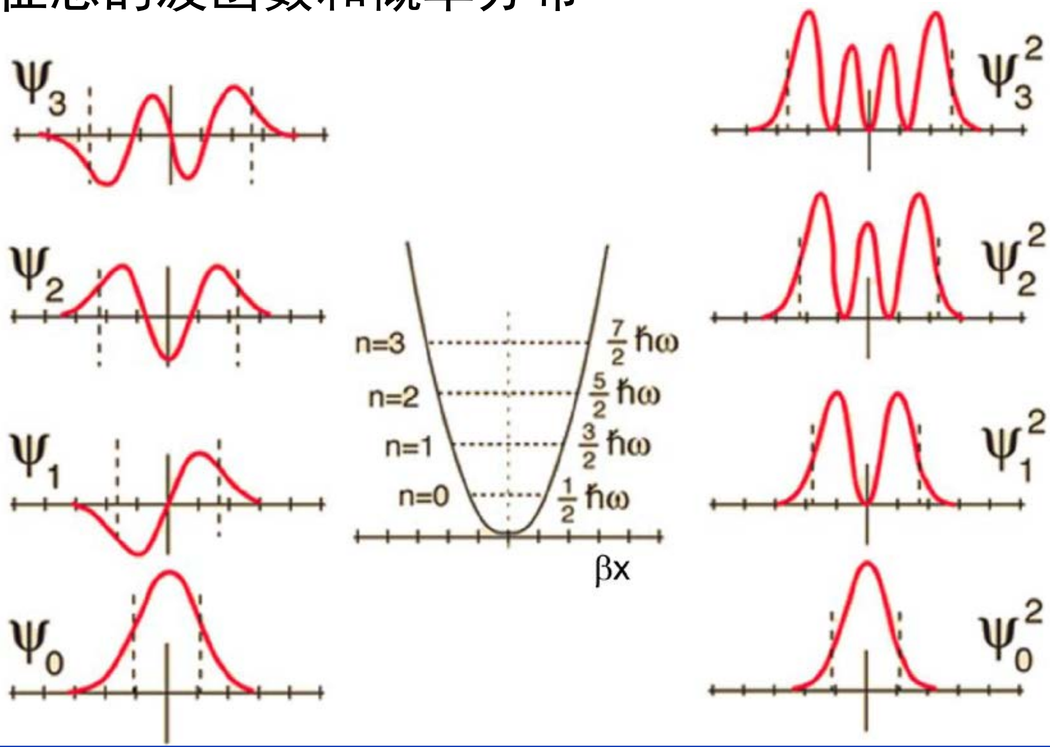
$$\begin{aligned}\psi_n(x) = \langle x|(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}(\frac{1}{\sqrt{2}})^n(-\frac{1}{\beta}\frac{d}{dx}+\beta x)^n\langle x|0\rangle \\ &= (\frac{\beta}{\sqrt{\pi}})^{1/2}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}(-\frac{1}{\beta}\frac{d}{dx}+\beta x)^n \exp(-\frac{1}{2}\beta^2x^2) \\ &= (\frac{\beta}{\sqrt{\pi}})^{1/2}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}H_n(\beta x)\exp(-\frac{1}{2}\beta^2x^2)\end{aligned}$$

其中，$H_n$ 是厄米多项式，它满足

$$H_n(x)\exp(-\frac{1}{2}x^2) = (-\frac{d}{dx}+x)^n\exp(-\frac{1}{2}x^2)$$

# 3.1 一维谐振子

- 最低四个本征态的波函数和概率分布




- 一个有用的结论：在一维谐振子的任意本征态$|n\rangle$下，动能和势能的期待值都是相等的，即$\langle n|\hat{T}|n\rangle = \langle n|\hat{V}|n\rangle$，其中$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$，$\hat{V} = \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$

- **例题：** 在$t = 0$时刻，一个谐振子处的状态为$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|2\rangle$求期待值$\langle\hat{x}\rangle$和$\langle\hat{x}^2\rangle$随时间的演化。

# 3.2 角动量

- 角动量的定义为

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$$

- 角动量的三个分量满足如下对易关系：

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \qquad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

- 我们用 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 表示总角动量，其定义为

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2$$

  它与 $\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$ 和 $\hat{L}_z$ 都对易

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_x] = 0, \qquad [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_y] = 0, \qquad [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$$

- 因此，我们选择力学量完全集为 $(\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z)$，寻找 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征态

$$\hat{\mathbf{L}}^2|\lambda\rangle = \mu|\lambda\rangle, \quad \hat{L}_z|\lambda\rangle = \nu|\lambda\rangle$$

- 我们采用代数方法，定义如下两个算符

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y$$

# 3.2 角动量

- $\hat{L}_{\pm}$与 $\hat{L}_z$ 和 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 的对易关系为

$$[\hat{L}_z, \hat{L}_{\pm}] = \pm\hbar\hat{L}_{\pm}, \qquad [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_{\pm}] = 0$$

$$\boxed{\hat{L}_{\pm} = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y}$$

- 利用上面两个对易关系，我们有

$$\hat{\mathbf{L}}^2(\hat{L}_{\pm}|\lambda\rangle) = \hat{L}_{\pm}(\hat{\mathbf{L}}^2|\lambda\rangle) = \mu\hat{L}_{\pm}|\lambda\rangle,$$

$$\hat{L}_z(\hat{L}_{\pm}|\lambda\rangle) = \pm\hbar\hat{L}_{\pm}|\lambda\rangle + \hat{L}_{\pm}\hat{L}_z|\lambda\rangle = (\nu \pm \hbar)(\hat{L}_{\pm}|\lambda\rangle)$$

  - 如果$|\lambda\rangle$是 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 和 $\hat{L}_z$ 的共同本征态，那么 $\hat{L}_{\pm}|\lambda\rangle$仍然是 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 的本征值为$\mu$的本征态，是 $\hat{L}_z$ 本征值为$\nu \pm \hbar$的本征态。$\hat{L}_+$ 和 $\hat{L}_-$ 分别被称为“上升”和“下降”算符。

- 对于一个给定的$\mu$，可以得到一系列$\hat{L}_z$的本征态，最近邻的两个相差$\hbar$。为了增加（减小）$\hat{L}_z$的本征值，可以连续应用上升（下降）算符，但是存在一个$\hat{L}_z$取最大本征值的状态，其满足

$$\hat{L}_+|\lambda_t\rangle = 0$$

# 3.2 角动量

❖ 设 $l\hbar$ 是 $\hat{L}_z$ 的最大本征值，则

$$\hat{L}_z|\lambda_t\rangle = l\hbar|\lambda_t\rangle, \quad \hat{\mathbf{L}}^2|\lambda_t\rangle = \mu|\lambda_t\rangle$$

$$\boxed{\hat{L}_+|\lambda_t\rangle = 0}$$

容易证明 $\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_\pm\hat{L}_\mp + \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z$

于是 $\hat{\mathbf{L}}^2|\lambda_t\rangle = (\hat{L}_-\hat{L}_+ + \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z)|\lambda_t\rangle = l(l+1)\hbar^2|\lambda_t\rangle$

因此 $\mu = l(l+1)\hbar^2$。这说明 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 的本征值可以用 $\hat{L}_z$ 的最大本征值来表示

➢ 还存在一个 $\hat{L}_z$ 取最小本征值的状态，满足

$$\hat{L}_-|\lambda_b\rangle = 0$$

❖ 设 $\bar{l}\hbar$ 是 $\hat{L}_z$ 的最小本征值，则

$$\hat{\mathbf{L}}^2|\lambda_b\rangle = (\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z)|\lambda_b\rangle = \bar{l}(\bar{l}-1)\hbar^2|\lambda_b\rangle$$

于是 $\mu = \bar{l}(\bar{l}-1)\hbar^2$

➢ 因此，我们有

$$l(l+1) = \bar{l}(\bar{l}-1)$$

可以求得 $\bar{l} = -l$（另一个解 $\bar{l} = l+1$ 不合理）

# 3.2 角动量

- 我们令 $\hat{L}_z$的本征值为 $m\hbar$，其中 $m$ 取值从 $-l$经过 $N$步“上升算符”的作用到 $+l$，相邻两个相差1。因此 $l=-l+N$，即 $l=N/2$，所以 $l$必须是整数或者半整数。
- 于是，$\hat{\mathbf{L}}^2$和 $\hat{L}_z$ 的共同本征态可以表示为$|l,m\rangle$，$\hat{\mathbf{L}}^2$和 $\hat{L}_z$ 的本征方程为

$$\hat{\mathbf{L}}^2|l,m\rangle = l(l+1)\hbar^2|l,m\rangle, \quad \hat{L}_z|l,m\rangle = m\hbar|l,m\rangle$$

其中 $l=0,1,2,\cdots$ （或 $l=1/2,3/2,5/2,\cdots$ ），$m=-l,-l+1,\cdots,l-1,l$。

- 令 $\hat{L}_-|l,m\rangle = c\hbar|l,m-1\rangle$，由于$\hat{L}_+^\dagger = \hat{L}_-$，因此

$$\langle l,m|\hat{L}_+\hat{L}_-|l,m\rangle = |c|^2\hbar^2$$

$$\boxed{\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_\pm\hat{L}_\mp + \hat{L}_z^2 \mp \hbar\hat{L}_z}$$

利用 $\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z$，我们有 $|c|^2 = l(l+1)-m(m-1)$，取实数解，有 $c=\sqrt{l(l+1)-m(m-1)}$

- 同样方法可得 $\hat{L}_+|l,m\rangle = \sqrt{l(l+1)-m(m+1)}\hbar|l,m+1\rangle$
- 因此，

$$\hat{L}_\pm|l,m\rangle = \sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\hbar|l,m\pm1\rangle$$

# 3.2 角动量

- 下面计算轨道角动量在坐标表象下的具体形式。我们采用球坐标，本征函数可以写为 $Y_{lm}(\theta,\phi)=\langle\theta,\phi|l,m\rangle$。$\hat{L}_x$，$\hat{L}_y$ 和 $\hat{L}_z$ 在球坐标系下的表示为

$$\hat{L}_x=-i\hbar(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cos\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$\hat{L}_y=-i\hbar(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta}-\sin\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$\hat{L}_z=-i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$$

- 梯子算符和 $\hat{\mathbf{L}}^2$ 的表示为

$$\hat{L}_\pm=\hat{L}_x\pm i\hat{L}_y=\pm\hbar e^{\pm i\phi}(\frac{\partial}{\partial\theta}\pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi})$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2=-\hbar^2[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}]$$

# 3.2 角动量

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y = \pm\hbar e^{\pm i\phi}(\frac{\partial}{\partial\theta} \pm i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi})$$

- 我们从 $\hat{L}_+|l,l\rangle = 0$ 开始，即

$$\hbar e^{i\phi}(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi})Y_{ll}(\theta,\phi) = 0 \quad \Rightarrow \quad (\frac{1}{\cot\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + i\frac{\partial}{\partial\phi})Y_{ll}(\theta,\phi) = 0$$

$Y_{ll}(\theta,\phi)$ 可以写为 $Y_{ll}(\theta,\phi) = f(\theta)g(\phi)$，因此我们有

$$\frac{1}{f(\theta)}\frac{1}{\cot\theta}\frac{df(\theta)}{d\theta} = -\frac{1}{g(\phi)}i\frac{dg(\phi)}{d\phi} = c$$

考虑到 $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi}$，我们有 $c = l$，所以

$$\frac{1}{f(\theta)}\frac{df(\theta)}{d\theta} = l\cot\theta, \qquad \frac{1}{g(\phi)}\frac{dg(\phi)}{d\phi} = il$$

解这两个方程，我们有

$$Y_{ll}(\theta,\phi) \propto \sin^l\theta e^{il\phi}$$

# 3.2 角动量

- 连续应用下降算符可以得到角动量的本征态

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=\alpha_m(\hat{L}_-)^{l-m}\sin^l\theta e^{il\phi}$$

其中 $\alpha_m$ 是归一化常数

- 利用连带Legendre多项式 $P_l^m(\cos\theta)$，归一化的本征态可以写为

$$Y_{lm}(\theta,\phi)=(-1)^m\sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_l^m(\cos\theta)e^{im\phi}$$

这也称为球谐函数。

- **例题：**一个粒子所处状态的角度部分为 $\psi(\theta,\phi)=\sqrt{2}Y_{11}(\theta,\phi)-Y_{10}(\theta,\phi)$。

（1）求 $\hat{L}_z$ 和 $\hat{L}_x$ 的期待值。

（2）如果对 $\hat{L}_x$ 做一次测量，那么可能的测量值和相应的概率是多少？