[Cohen 量子力学 Vol.1] Chap.5 一维谐振子

张沐华

July 26th 2020

本章讨论一个物理上无论是在经典理论还是量子理论中都非常重要、又足够简单的模型：一维谐振子。在经典力学和经典场背景下的量子力学中，它的基本形式，就是一个质量为 m 的粒子，处于下述一维势场中：

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (k > 0)$$

粒子受到唯一的外力——恢复力

$$F = -\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} = -kx$$

在经典力学中，结合运动定律 $-kx = m\ddot{x}$ ，可以解得粒子运动为一个简谐振荡，角频率为

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

谐振子模型之所以如此重要，实际上是因为它代表了物理在研究现实世界并尝试建模过程中一个非常重要的思想：线性化近似。事实上，在研究有关物理系统在平衡位置附近的行为时，所得的方程在微小振动的极限情况下就是谐振子方程；或者说，无论外场的形式如何，微扰作用下的行为都可以（利用展开等手段）近似为线性的。

另一方面，对于经典场，可以将一般的场构形按照一系列简谐模式展开；而这些展开系数，一般也是满足谐振子方程，且特征频率正是相应模式的角频率。因此从数学上看，经典场也相当于是由无穷多独立的谐振子构成。

还有其他很多方面，总而言之谐振子模型是极为重要、且少有的可以严格求解的简单模型。

1 基本知识

1.1 经典力学中的谐振子

势能：

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 \quad (k > 0)$$

粒子运动遵从经典动力学方程

$$m\ddot{x} = -\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x} = -kx$$

其通解为简谐振荡

$$x = A\cos(\omega t - \varphi)$$

其中特征频率为 $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ ，积分常数 A 、φ 由初始条件决定。

粒子的动能

$$T = \frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2}m\omega^2(A^2 - x^2)$$

于是总能量

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2A^2$$

可见粒子的总能量与时间无关。又由于 A 可以取任意正值，因而**经典力学中谐振子的总能量可以是任意正数或零**。

1.2 哈密顿算符的一般性质

下面考虑量子力学中的一维谐振子。根据对应关系，可以得到系统的哈密顿算符

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2X^2$$

它与时间无关，因而对量子系统的研究就可完全归结于它的本征方程 $H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$ 。取坐标 $\{|x\rangle\}$ 表象：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\varphi(x) = E\varphi(x)$$

正式求解之前可以首先看出几个要点：

（1）哈密顿算符的本征值都是正的。一般而言可以证明，若势函数 $V(x)$ 具有下界，则哈密顿算符 $H = \frac{P^2}{2m} + V$ 的各本征值都大于 $V(x)$ 的极小值，即 $V(x) \geq V_m \Rightarrow E > V_m$ 。

（2）H 的本征函数具有确定的宇称。这是因为势函数是偶函数：$V(-x) = V(x)$ （事实上将会看到 H 的本征值都是非简并的，因而定态波函数一定为奇函数或偶函数）。

（3）能谱是离散的。不论总能量数值如何，粒子的经典运动都是局限在 Ox 轴上的一个有界区间内；这种情况下可以证明，哈密顿算符的本征值是离散的。

2 哈密顿算符的本征值

2.1 符号

观察算符 X 、P 显然是有量纲的。下面引入三个无量纲可观测量:

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X$$

$$\hat{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}P$$

$$\hat{H} = \frac{1}{\hbar\omega}H$$

他们之间满足关系:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(\hat{X}^2 + \hat{P}^2\right)$$

正则对易关系为

$$\left[\hat{X}, \hat{P}\right] = \mathrm{i}$$

于是可将前述本征方程表示为

$$\hat{H}|\varphi_\nu^i\rangle = \varepsilon_\nu|\varphi_\nu^i\rangle$$

它的本征值 ε_ν 也是无量纲数。

考虑完全平方式 $x^2 + p^2 = (x + \mathrm{i}p)(x - \mathrm{i}p)$,希望将 $\hat{H}$ 也写成类似形式以简化运算。事实上,由于 $\hat{X}$ 、$\hat{P}$ 不可对易,因而 $\hat{X}^2 + \hat{P}^2 \neq (\hat{X} + \mathrm{i}\hat{P})(\hat{X} - \mathrm{i}\hat{P})$ 。但是仍可以引入这样的算符来简化运算:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + \mathrm{i}\hat{P})$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - \mathrm{i}\hat{P})$$

显然它们不是厄米算符,但是互为伴随算符。于是

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)$$

$$\hat{P} = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)$$

正则对易关系也可以写为等价形式:

$$[a, a^\dagger] = \frac{\mathrm{i}}{2}\left[\hat{P}, \hat{X}\right] - \frac{\mathrm{i}}{2}\left[\hat{X}, \hat{P}\right] = \mathbf{1}$$

还有几个常用公式：

$$
\begin{aligned}
a^\dagger a &= \frac{1}{2}(\hat{X}-\mathrm{i}\hat{P})(\hat{X}+\mathrm{i}\hat{P}) = \frac{1}{2}(\hat{X}^2+\hat{P}^2+\mathrm{i}\hat{X}\hat{P}-\mathrm{i}\hat{P}\hat{X}) \\
&= \frac{1}{2}(\hat{X}^2+\hat{P}^2-\mathbf{1}) \\
aa^\dagger &= \frac{1}{2}(\hat{X}+\mathrm{i}\hat{P})(\hat{X}-\mathrm{i}\hat{P}) = \frac{1}{2}(\hat{X}^2+\hat{P}^2-\mathrm{i}\hat{X}\hat{P}+\mathrm{i}\hat{P}\hat{X}) \\
&= \frac{1}{2}(\hat{X}^2+\hat{P}^2+\mathbf{1})
\end{aligned}
$$

于是 $\hat{H}$ 可以简单地表示为

$$\hat{H} = aa^\dagger - \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}} = a^\dagger a + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}$$

再引入一个算符，即两个线性项的乘积

$$N = a^\dagger a = aa^\dagger - \mathbf{1}$$

它是厄米算符

$$N^\dagger = a^\dagger (a^\dagger)^\dagger = a^\dagger a = N$$

于是

$$\hat{H} = N + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}$$

可见 $\hat{H}$ 的与 N 的本征矢完全相同。

再来分别计算对易子：

$$
\begin{aligned}
[N,a] &= [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a,a] + [a^\dagger, a]a = -a \\
[N,a^\dagger] &= [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger [a,a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger]a = a^\dagger
\end{aligned}
$$

以算符 a 、$a^\dagger$ 、N 为基础来研究谐振子。$\hat{H}$ 的本征方程，等价于研究

$$N|\varphi_\nu^i\rangle = \nu|\varphi_\nu^i\rangle$$

其中 $\nu = \varepsilon_\nu - \frac{1}{2} = \frac{E_\nu}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}$

2.2 谱的确定

首先给出若干引理：

引理 I: 算符 N 的本征值 ν 都是非负数 $\nu \geq 0$ 。

考虑它的任一本征矢 $|\varphi_\nu^i\rangle$ ，矢量 $a|\varphi_\nu^i\rangle$ 的模方非负:

$$\left\|a|\varphi_\nu^i\rangle\right\|^2 = \langle\varphi_\nu^i|a^\dagger a|\varphi_\nu^i\rangle = \langle\varphi_\nu^i|N|\varphi_\nu^i\rangle = \nu\langle\varphi_\nu^i|\varphi_\nu^i\rangle \geq 0 \Longrightarrow \nu \geq 0$$

引理 II: 设 $|\varphi_\nu^i\rangle \neq 0$ ：若 $\nu = 0$ ，则 $a|\varphi_{\nu=0}^i\rangle = 0$ ；若 $\nu > 0$ ，则 $a|\varphi_\nu^i\rangle = |\varphi_{\nu-1}^j\rangle \neq 0$ 。

若 $\nu = 0$ ，根据前一引理，$\|a|\varphi_\nu^i\rangle\|^2 = 0$ ，于是 $a|\varphi_\nu^i\rangle = 0$ 。进一步地，任何满足 $a|\varphi\rangle = 0$ 的右矢 $|\varphi\rangle$ ，由于 $a^\dagger a|\varphi\rangle = N|\varphi\rangle = 0$ ，故它一定是属于本征值 $\nu = 0$ 的本征矢。

若 $\nu > 0$ ，首先 $a|\varphi_\nu^i\rangle \neq 0$ ；而利用对易关系

$$\begin{aligned} N[a|\varphi_\nu^i\rangle] &= (Na)|\varphi_\nu^i\rangle = [N,a]|\varphi_\nu^i\rangle + (aN)|\varphi_\nu^i\rangle = -a|\varphi_\nu^i\rangle + a\nu|\varphi_\nu^i\rangle \\ &= (\nu-1)[a|\varphi_\nu^i\rangle] \end{aligned}$$

因此 $a|\varphi_\nu^i\rangle$ 是属于本征值 $(\nu-1)$ 的本征矢。

引理 III: 设 $|\varphi_\nu^i\rangle \neq 0$ ： $a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle = |\varphi_{\nu+1}^j\rangle \neq 0$。

首先计算其模方

$$\left\|a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle\right\|^2 = \langle\varphi_\nu^i|aa^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle = \langle\varphi_\nu^i|(N+1)|\varphi_\nu^i\rangle = (\nu+1)\langle\varphi_\nu^i|\varphi_\nu^i\rangle$$

根据 $\nu > 0$ 可见 $a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle \neq 0$ 。进一步，类似上面利用对易关系

$$\begin{aligned} N[a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle] &= (Na^\dagger)|\varphi_\nu^i\rangle = [N,a^\dagger]|\varphi_\nu^i\rangle + (a^\dagger N)|\varphi_\nu^i\rangle = a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle + a^\dagger\nu|\varphi_\nu^i\rangle \\ &= (\nu+1)[a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle] \end{aligned}$$

因此 $a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle$ 是属于本征值 $(\nu+1)$ 的本征矢。

根据上述引理可以确定 N 的谱。考虑 N 的任一本征值 $\nu \geq 0$ 及其非零本征矢 $|\varphi_\nu^i\rangle$ 。假设 ν 不是整数，则一定存在整数 n 满足 $n < \nu < n+1$ 。考虑矢量序列:

$$|\varphi_\nu^i\rangle,\quad a|\varphi_\nu^i\rangle,\quad a^2|\varphi_\nu^i\rangle,\quad \cdots,\quad a^p|\varphi_\nu^i\rangle,\quad \cdots,\quad a^n|\varphi_\nu^i\rangle$$

其中每一个矢量都非零，且都是 N 的本征矢，分别属于本征值 $\nu - p$ 。显然本征矢 $a^n|\varphi_\nu^i\rangle$ 对应的本征值为 $\nu - n \in (0,1)$ 。

根据引理 II, 将算符 a 作用于 $a^n|\varphi_\nu^i\rangle$ ，应当得到一个非零矢量, 且是属于本征值 $\nu-n-1$ 的本征矢。但是 $\nu-n-1<0$ ，与引理 I 矛盾。因而前提假设 "ν 不是整数" 是错误的，因而 **N 的本征值必须是非负整数**。

这样根据引理 III，就能够推知，**算符 N 的谱由全体非负整数所构成**。

由此可以得出哈密顿算符 H 的本征值：

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

由此自然地得出，**量子力学中谐振子的能力是量子化的，而且能量最小可能值（基态能量）是 $\frac{1}{2}\hbar\omega$ ，而不是零**。

现在可以尝试对算符 a 、$a^\dagger$ 、N 的物理意义进行一个初步的解释。将 a 作用于 H 的属于本征值 E_n 的本征矢，得到属于本征值 $E_{n-1}=E_n-\hbar\omega$ 的一个本征矢；$a^\dagger$ 的作用则给出属于本征值 $E_{n+1}=E_n+\hbar\omega$ 的本征矢。可见它们的作用相当于是分别使得一个能量为 $\hbar\omega$ 的能量子消失或出现，因而 a 、$a^\dagger$ 分别被称为 "**湮灭算符**" 和 "**产生算符**"。同样的理解，N 的本征值 $\nu=\frac{E_\nu}{\hbar\omega}-\frac{1}{2}$ 则相当于是在 "计数" 系统的总能量除了基态能量外 $\frac{1}{2}\hbar\omega$ 一共相当于多少个能量为 $\hbar\omega$ 的能量子（或者说在基态能量基础上产生了多少能量为 $\hbar\omega$ 的能量子），因而形象地称为 "**粒子数算符**"。这几个算符在量子场论中的物理图景将会更加明晰。

2.3 本征值的简并度

下面证明一维谐振子的能级非简并。

2.3.1 基态能级的非简并

根据前述引理，H 的所有属于 $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$ 的本征矢，同时都是 N 的属于 $\nu=0$ 的本征矢，都满足 $a|\varphi_\nu^i\rangle=0$ ，即坐标表象下的

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar}x+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\varphi_0^i(x)=0$$

其通解是

$$\varphi_0^i(x)=c\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

可见全体解构成一个一维线性空间，因而基态能级 $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$ 简并度为 $g_0=1$ ，或者说基态能级非简并。

2.3.2 所有能级的非简并

运用数学归纳法，只需证明：若能级 E_n 非简并，则能级 E_{n+1} 也非简并。

因此假设属于 E_n 的全体本征矢只差一个常数，因而可用唯一的归一化右矢 $|\varphi_n\rangle$ 表示。再考虑属于本征值 E_{n+1} 的非零本征矢 $|\varphi^i_{n+1}\rangle$ ，根据引理，$a|\varphi^i_{n+1}\rangle$ 不为零，且是属于本征值 E_n 的本征矢。于是

$$a|\varphi^i_{n+1}\rangle = c^i|\varphi_n\rangle$$

其中 c^i 是复数。再将算符 $a^\dagger$ 作用：

$$a^\dagger a|\varphi^i_{n+1}\rangle = c^i a^\dagger|\varphi_n\rangle \Longrightarrow |\varphi^i_{n+1}\rangle = \frac{c^i}{n+1}a^\dagger|\varphi_n\rangle$$

可见全体 $|\varphi^i_{n+1}\rangle$ 也构成一个一维线性空间，于是 E_{n+1} 也是非简并的。

结合基态能级的非简并，可知一维谐振子的全体能级都是非简并的。因此以后就将本征矢 $|\varphi^i_n\rangle$ 简单记为 $|\varphi_n\rangle$ 。

3 哈密顿算符的本征态

3.1 $\{|\varphi_n\rangle\}$ 表象

算符 N 、H 都是观察算符，于是它们的本征矢的集合（实际上是相同的）$\{|\varphi_n\rangle\}$ 都构成一维谐振子态空间的一个基；且由于它们是非简并的，因此 N 、H 各自本身就构成一个 CSCO。

3.1.1 基矢量表为 $|\varphi_0\rangle$ 的函数

对于 $n=0$ 基态右矢满足 $a|\varphi_0\rangle = 0$ ，是非简并的。在归一化意义下，它的不确定度只限于一个全局相位因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta}$ 。

对于 $n = 1$ ，前面已经证明，$|\varphi_1\rangle = c_1 a^\dagger|\varphi_0\rangle$ 。适当地选择相位因子使得归一化系数 $c_1 \in \mathbb{R}$ ，则

$$\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = |c_1|^2\langle\varphi_0|aa^\dagger|\varphi_0\rangle = |c_1|^2\langle\varphi_0|N+1|\varphi_0\rangle = |c_1|^2\langle\varphi_0|\varphi_0\rangle$$

从而 $c_1 = 1$ ，于是 $|\varphi_1\rangle = a^\dagger|\varphi_0\rangle$ 。

采用类似的方法，可以推广到一般情形：若已知归一化 $|\varphi_{n-1}\rangle$ ，那么归一化 $|\varphi_n\rangle$ 就可以表示为 $|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}a^\dagger|\varphi_{n-1}\rangle$

从而可以将任意能级的本征矢表示为 $|\varphi_0\rangle$ 的函数：

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|\varphi_{n-1}\rangle$$

3.1.2 正交归一关系和封闭性关系

集合 $\{|\varphi_n\rangle\}$ 中的各个矢量满足

$$\begin{cases} \langle\varphi_{n'}|\varphi_n\rangle = \delta_{nn'} \\ \sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1 \end{cases}$$

这说明 $\{|\varphi_n\rangle\}$ 构成态空间的一个正交归一基。

3.1.3 各算符的作用

由于算符 X 、P 都是算符 a 、$a^\dagger$ 的线性组合，因而所有的（有经典对应的）物理量也都可以表示为算符 a 、$a^\dagger$ 的函数；而又由于算符对于矢量 $|\varphi_n\rangle$ 的作用十分简单，因而在大多数情况下，采用 $\{|\varphi_n\rangle\}$ 表象，对于计算可观测量的矩阵元和平均值显得十分方便。

算符 a 、$a^\dagger$ 对 $|\varphi_n\rangle$ 的作用：

$$a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle$$
$$a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle$$

立即可以得到

$$X|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle + \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle\right]$$
$$P|\varphi_n\rangle = \sqrt{m\hbar\omega}\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)|\varphi_n\rangle = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left[\sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle - \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle\right]$$

从而算符 a ，$a^\dagger$ ，X ，P 在 $\{|\varphi_n\rangle\}$ 表象中的矩阵元分别为

$$\langle\varphi_{n'}|a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1}$$

$$\langle\varphi_{n'}|a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}$$

$$\langle\varphi_{n'}|X|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1}\right]$$

$$\langle\varphi_{n'}|P|\varphi_n\rangle = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left[\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} - \sqrt{n}\delta_{n',n-1}\right]$$

直观来看，

$$[a] = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

$$[a^\dagger] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

它们互成厄米共轭矩阵；而 X 、P 的矩阵则分别是这两者相加、相减（再乘一个常数因子），各自都是厄米矩阵。

3.2 与定态相联系的波函数

现在采用坐标 $\{|x\rangle\}$ 表象，记 $\varphi_n(x) = \langle x|\varphi_n\rangle$ 表示定态的波函数。

前面已经求解了基态波函数：

$$\varphi_0(x) = \langle x|\varphi_0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$$

系数的选择是归一化系数。为求得其他能级的波函数，可以利用关系式 $|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|\varphi_{n-1}\rangle$ 在 $\{|x\rangle\}$ 表象下的对应形式：

$$\begin{aligned}\varphi_n(x) = \langle x|\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(a^\dagger)^n|\varphi_{n-1}\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{2^n}}\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]^n \varphi_0(x)\end{aligned}$$

或可写作

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left[\frac{\beta^2}{\pi}\right]^{\frac{1}{4}}\left[\beta x - \frac{1}{\beta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]^n \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta^2x^2}$$

其中 $\beta=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ 。

上述通式还可写成另一种很有用的形式。为了看出这一点，作变量代换：$x\to\tau=\beta x$ ：

$$\begin{aligned}\varphi_n(\tau)&=C\left[\tau-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\right]^n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}=C\left[\sum_{i=0}^{n}\tau^{n-i}(-1)^i\frac{\mathrm{d}^i}{\mathrm{d}\tau^i}\right]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}\\&=C\sum_{i=0}^{n}\left[\tau^{n-i}(-1)^i\frac{\mathrm{d}^i}{\mathrm{d}\tau^i}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}\right]\end{aligned}$$

为了看出规律，逐项写出各个求导部分：

$$\begin{aligned}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}&=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}\tau=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}\left[\tau-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\right]1\\\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}&=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}(\tau^2-1)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}\left[\tau-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\right]\tau\\-\frac{\mathrm{d}^3}{\mathrm{d}\tau^3}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}&=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}(\tau^3-3\tau)=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}\left[\tau-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\right](\tau^2-1)\\&\cdots\cdots\\(-1)^i\frac{\mathrm{d}^i}{\mathrm{d}\tau^i}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}&=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}\left[\tau-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\right]^n1\end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned}\varphi_n(\tau)&=C\sum_{i=0}^{n}\left[\tau^{n-i}(-1)^i\frac{\mathrm{d}^i}{\mathrm{d}\tau^i}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}\right]=\sum_{i=0}^{n}\left[\tau^{n-i}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}\left(\tau-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\right)^n1\right]\\&=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}\left[\sum_{i=0}^{n}\tau^{n-i}\left(\tau-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\right)^n\right]1=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}\left[\tau+\left(\tau-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\right)\right]^n1\\&=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\tau^2}\left[2\tau-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\right]^n1\end{aligned}$$

即

$$\varphi_n(x)=\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left[\frac{\beta^2}{\pi}\right]^{\frac{1}{4}}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta^2x^2}H(\beta x)$$

可见 $\varphi_n(x)$ 的通式是由三部分相乘而成：

1）归一化系数 $\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left[\frac{\beta^2}{\pi}\right]^{\frac{1}{4}}$ **；**

2）指数部分 $\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta^2x^2}$ **；**

3）多项式 $H_n(\beta x)=\left[2\beta x-\frac{1}{\beta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]^n1$ 。

其中最后一部分的多项式 $H_n(z)=\left[2z-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right]^n1$ 被称为**第 n 阶厄米多项式**。在某些计算当中，利用厄米多项式的性质会使得运算大大简化。

直观起见，将前三个能级的波函数及相应的概率密度画图如下：

可见：当 n 增大即能级升高时，$\varphi_n(x)$ 在 Ox 轴上具有显著值的区域也随之变宽；这相当于经典力学中谐振子运动的振幅随能量的增大而增大。

由此可以推知，**粒子势能的平均值是随着 n 的增大而增大的**，粗略来说是因为 $\varphi_n(x)$ 具有显著值的部分（即峰值附近的一段）逐渐向 x^2 大的区段移动——相应于 $V(x)$ 也变大。

此外，$\varphi_n(x)$ 零点个数也是 n ，由此又可推知**粒子动能的平均值也是随着 n 的增大而增大的**，粗略来说，因为动能在坐标表象下为：

$$\frac{1}{2m}\left\langle P^2\right\rangle = -\frac{\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\varphi_n^*(x)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\varphi_n(x)\mathrm{d}x$$

随着零点增多，波函数的曲率也增大，于是二阶导数 $\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\varphi_n(x)$ 也增大。

势能与动能的平均值的精确计算会在后面给出。

最后，还能看到，n **越大，概率密度** $|\varphi_n(x)|^2$ $x\approx\pm A$ **处的数值越显著**（A 是总能量为 E_n 的经典谐振子的振幅，$A=\sqrt{\frac{2E_n}{m\omega^2}}=\sqrt{\frac{2E_n}{k}}$ ）。这容易联想到经典力学中的一个结论：谐振子在振幅附近的速度较小而在平衡位置附近速度较大，因而在 $x=\pm A$ 附近平均耗费的时间多于在平衡位置 $x=0$ 附近耗费的时间。

4　讨论

4.1　X 和 P 在 $|\varphi_n\rangle$ 态中的平均值和方均根偏差

由于 X 和 P 都不与 H 对易，因此定态不是它们的本征态，即若谐振子处于某一定态 $|\varphi_n\rangle$ 中那么测量可观测量 X 和 P 的结果可以是任意的。

根据之前矩阵元的计算：

$$\langle X\rangle_{\varphi_n} = \langle\varphi_n|X|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\sqrt{n+1}\delta_{n,n+1}+\sqrt{n}\delta_{n,n-1}\right]=0$$

$$\langle P\rangle_{\varphi_n} = \langle\varphi_n|P|\varphi_n\rangle = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left[\sqrt{n+1}\delta_{n,n+1}-\sqrt{n}\delta_{n,n-1}\right]=0$$

可见两者期望都为 0，换句话说没有对角元。

为求方均根偏差，要算 X^2 、P^2 的期望。而

$$X^2=\frac{\hbar}{2m\omega}(a^\dagger+a)(a^\dagger+a)=\frac{\hbar}{2m\omega}({a^\dagger}^2+aa^\dagger+a^\dagger a+a^2)$$

$$P^2=-\frac{m\hbar\omega}{2}(a^\dagger-a)(a^\dagger-a)=-\frac{\hbar}{2m\omega}({a^\dagger}^2-aa^\dagger-a^\dagger a+a^2)$$

由于

$$\langle\varphi_n|a^2|\varphi_n\rangle = c\langle\varphi_n|\varphi_{n-2}\rangle = 0$$
$$\langle\varphi_n|a^{\dagger 2}|\varphi_n\rangle = c'\langle\varphi_n|\varphi_{n+2}\rangle = 0$$
$$\langle\varphi_n|(a^\dagger a + aa^\dagger)|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|(2N+1)|\varphi_n\rangle = 2n+1$$

因此

$$\langle X^2\rangle_{\varphi_n} = \langle\varphi_n|X^2|\varphi_n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega}$$
$$\langle P^2\rangle_{\varphi_n} = \langle\varphi_n|P^2|\varphi_n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)m\hbar\omega$$

从而

$$\Delta X = \sqrt{\langle X\rangle - \langle X^2\rangle} = \sqrt{\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar}{m\omega}}$$
$$\Delta P = \sqrt{\langle P\rangle - \langle P^2\rangle} = \sqrt{\left(n+\frac{1}{2}\right)m\hbar\omega}$$
$$\Delta X \cdot \Delta P = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar \geq \frac{\hbar}{2}$$

这里自然出现了不确定性关系。在基态时，不确定度的乘积达到了理论的极小值 $\frac{\hbar}{2}$ 。后面会看到，实际上这与基态波函数为高斯型函数有关。

若以 x_{M} 表示能量为 $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ 的经典谐振子的振幅，p_{M} 表示对应的经典动量振幅 $p_{\mathrm{M}} = m\omega x_{\mathrm{M}}$ ，则有：

$$\Delta X = \frac{1}{\sqrt{2}}x_{\mathrm{M}}$$
$$\Delta P = \frac{1}{\sqrt{2}}p_{\mathrm{M}}$$

有了上述内容就可以写出谐振子的能量。粒子在态 $|\varphi_n\rangle$ 中的**平均势能**为：

$$\langle V(X)\rangle_{\varphi_n} = \frac{1}{2}m\omega^2\langle X^2\rangle_{\varphi_n} = \frac{1}{2}m\omega^2\left(\Delta X\right)^2$$

平均动能为：

$$\left\langle\frac{P^2}{2m}\right\rangle_{\varphi_n} = \frac{1}{2m}\left(\Delta P\right)^2$$

带入前面的结果即可得到

$$\langle V(X)\rangle_{\varphi_n} = \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{E_n}{2}$$
$$\left\langle \frac{P^2}{2m}\right\rangle_{\varphi_n} = \frac{1}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \frac{E_n}{2}$$

可见**谐振子的平均动能和平均势能相等，都为总能量的一半**。

量子谐振子的定态 $|\varphi_n\rangle$ 没有经典对应（不存在能量不为零、但是位置和动量的平均值都为零的经典运动），但是定态 $|\varphi_n\rangle$ 却可以类比于这样的大量经典运动的平均效应，即

$$x = x_{\mathrm{M}}\cos(\omega t - \varphi_S)$$

其中初相位 φ_S 是随机而非确定的。于是大量这样的运动的平均值：

$$\begin{cases} \overline{x} = \dfrac{x_{\mathrm{M}}}{2\pi}\displaystyle\int_0^{2\pi}\cos(\omega t-\varphi_S)\mathrm{d}\varphi_S = 0 \\ \overline{p} = \dfrac{p_{\mathrm{M}}}{2\pi}\displaystyle\int_0^{2\pi}\sin(\omega t-\varphi_S)\mathrm{d}\varphi_S = 0 \end{cases}$$

以及

$$\begin{cases} \overline{x^2} = \dfrac{x_{\mathrm{M}}^2}{2\pi}\displaystyle\int_0^{2\pi}\cos^2(\omega t-\varphi_S)\mathrm{d}\varphi_S = \dfrac{x_{\mathrm{M}}^2}{2} \\ \overline{p^2} = \dfrac{p_{\mathrm{M}}^2}{2\pi}\displaystyle\int_0^{2\pi}\sin^2(\omega t-\varphi_S)\mathrm{d}\varphi_S = \dfrac{p_{\mathrm{M}}^2}{2} \end{cases}$$

于是方均根偏差

$$\begin{cases} \delta x = \sqrt{\overline{x^2}-\overline{x}^2} = \dfrac{x_{\mathrm{M}}}{\sqrt{2}} \\ \delta p = \sqrt{\overline{p^2}-\overline{p}^2} = \dfrac{p_{\mathrm{M}}}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

4.2 基态的性质

经典力学中谐振子的最低能量，是其静止在势能最低点处的状态，此时其动能和势能均为零；而在量子力学中谐振子最低能态即基态，是 $|\varphi_0\rangle$，其对应的能量是 $\frac{1}{2}\hbar\omega$ 而不是零。相应地，其波函数具有一定的空间延展范围，也代表着其位置可能值具有一定的范围。这个范围可用方均根偏差 $\Delta X = \sqrt{\hbar/2m\omega}$ 来衡量。

这可以由不确定性关系来帮助理解，后者要求势能与动能不可以同时减小。下面可以半定量地给出能量的数量级：

若空间延展范围的特征长度是 ξ ，那么平均势能的数量级

$$\overline{V} \simeq \frac{1}{2}m\omega^2\xi^2$$

而平均动能近似为

$$\overline{T} = \frac{\overline{p^2}}{2m} \simeq \frac{\hbar^2}{2m\xi^2}$$

于是总能量的数量级为

$$\overline{E} = \overline{V} + \overline{T} \simeq \frac{\overline{p^2}}{2m} \simeq \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\xi^2$$

三者的大致变化情况如图:

可见在 $\xi_\mathrm{m} \simeq \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ 附近，总能量取极小值 $\overline{E}_\mathrm{m} \simeq \hbar\omega$ ；这与前面结果的数量级大致相同。

4.3 平均值随时间的演化

在 $\{|\varphi_n\rangle\}$ 表象下考虑可以表示为如下形式的归一化初态（即非定态）:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0)|\varphi_n\rangle$$

则其演化可以利用定态能量表示为

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E_n t}{\hbar}}|\varphi_n\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t}|\varphi_n\rangle$$

于是任意可观测量 A 的平均值作为时间的函数，由下式给出

$$\langle A\rangle(t) = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} c_m^*(0)c_n(0)A_{mn}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m-n)\omega t}$$

其中 $A_{mn} = \langle\varphi_m|A|\varphi_n\rangle$ 。于是，平均值随时间的变化只涉及角频率 ω 及各次倍频，即各个玻尔频率。

特别地，考虑 X 与 P 的平均值。之前已经讨论过，它们的矩阵只有 $m = n \pm 1$ 的那些矩阵元非零，即 $\langle X\rangle(t)$ 、$\langle P\rangle(t)$ 表达式中只有基频项 $\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\omega t}$ 。

此外，结合埃伦费斯特定理的讨论，对于谐振子势能 $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ ，由于

$$\left.\begin{aligned} -\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}(X)\right\rangle &= -\langle kX\rangle = -k\langle X\rangle \\ \left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}V(x)\right]_{x=\langle X\rangle} &= -k\langle X\rangle \end{aligned}\right\} -\left\langle\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}(X)\right\rangle = \left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}V(x)\right]_{x=\langle X\rangle}$$

可见满足该条件，说明对于一维谐振子来说，其波包中心的运动严格满足经典力学规律，换句话说 $\langle X\rangle(t)$ 、$\langle P\rangle(t)$ 都严格满足经典规律。事实上根据埃伦费斯特定理可得：

$$\langle X\rangle(t) = \langle X\rangle(0)\cos\omega t + \frac{1}{m\omega}\langle P\rangle(0)\sin\omega t$$
$$\langle P\rangle(t) = \langle P\rangle(0)\cos\omega t - m\omega\langle X\rangle(0)\sin\omega t$$