谐振子

步允霆

2023 年 12 月 25 日

目录

1 谐振子模型

1.1 经典力学中的谐振子

一维谐振子在下述的势场中

$$V(x)=\frac{1}{2}kx^2 \tag{1}$$

粒子受到的恢复力为:

$$F_x=-\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}=-kx \tag{2}$$

在经典力学中，此粒子的运动在 Ox 轴上的投影是围绕着点 $x=0$ 的正弦型振荡，其角频率为

$$\omega=\sqrt{\frac{k}{m}} \tag{3}$$

粒子遵从如下的运动方程

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}=-\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}=-kx \tag{4}$$

这个方程的通解具有如下形式

$$x=x_M\cos(\omega t-\varphi) \tag{5}$$

粒子的总能量为

$$E=T+V=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2 \tag{6}$$

将(5)带入上式子得

$$E=\frac{1}{2}m\omega^2x_M^2 \tag{7}$$

由此可见，粒子的能量与时间无关，且由于 x_M 可以取任意值，故能量可以为任意正数或零。

现在考虑任意的势 $V(x)$，他的极小值位于 $x=x_0$。将函数 $V(x)$ 在点 x_0 附近展开

$$V(x)=a+b(x-x_0)^2+c(x-x_0)^3+\cdots \tag{8}$$

展开系数为

$$\begin{aligned} a&=V(x_0)\\ b&=\frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}\right)_{x=x_0}\\ c&=\frac{1}{3!}\left(\frac{\mathrm{d}^3V}{\mathrm{d}x^3}\right)_{x=x_0} \end{aligned} \tag{9}$$

如果粒子在 x_0 附近运动的振幅足够小，以致 $(x-x_0)^3$ 与前面相较可以忽略，那么我们处理的就是一个谐振子问题了，此时动力学方程近似为

$$F_x=-\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}\simeq-2b(x-x_0) \tag{10}$$

其角频率 ω 与 $V(x)$ 的二阶导数在 $x=x_0$ 处的值有关：

$$\omega=\sqrt{\frac{2b}{m}}=\sqrt{\frac{1}{m}\left(\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}\right)_{x=x_0}} \tag{11}$$

由于运动的振幅很小，故谐振子的能量将会很小。

1.2 哈密顿算符

在量子力学中，根据量子化规则，用 X 与 P 算符代替 x 与 p，他们满足关系：

$$[X,P]=\mathrm{i}\hbar \tag{12}$$

于是我们很容易得到体系的哈密顿算符：

$$H=\frac{P^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2X^2 \tag{13}$$

由于 H 与时间无关，对谐振子的量子研究归结于求本征方程：

$$H|\varphi\rangle=E|\varphi\rangle \tag{14}$$

在 $|x\rangle$ 表象中，可以写为：

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\varphi(x)=E\varphi(x) \tag{15}$$

2 多项式方法求解本征值方程

2.1 二阶线性常微分方程的级数解法

2.1.1 二阶线性常微分方程

形式为：

$$y''+P(x)y'+Q(x)y=0 \tag{16}$$

假设(16)的解可在 x_0 的邻域进行泰勒展开：

$$y=a_0+a_1(x-x_0)+a_2(x-x_0)^2+a_3(x-x_0)^3+\cdots \tag{17}$$

系数为

$$
\begin{aligned}
a_0 &= y_{(x=x_0)} \\
a_1 &= y'_{(x=x_0)} \\
a_2 &= \frac{1}{2} y''_{(x=x_0)} \\
a_3 &= \frac{1}{3!} y'''_{(x=x_0)}
\end{aligned} \tag{18}
$$

如果 a_0, a_1 已知，则由(16)

$$
y''_{(x=x_0)} = [-P(x)y' - Q(x)y]_{(x=x_0)} \tag{19}
$$

故之后的系数也可以求得。

2.1.2 级数解法

如果方程(16)可以写成如下形式：

$$
P(x)y'' + Q(x)y' + R(x)y = 0 \tag{20}
$$

展开 y

$$
y = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \tag{21}
$$

则

$$
y' = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k x^{k-1} \tag{22}
$$

$$
y'' = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k(k-1) x^{k-2} \tag{23}
$$

将(21)(22)(23)带入(20)，则得包含 x 的各幂次的恒等式，每一幂次的系数都必须等于零。由 x^k 的系数为零，可得

$$
a_k = c_1 a_{k-1} + c_2 a_{k-2} + \cdots + c_{k-1} a_1 + c_k a_0 \tag{24}
$$

式(24)称为递推公式。

为了比较 x^k 项的系数,我们可以将(22)(23)变换成 x^k 项的加和。由(22)得

$$y' = \sum_{k=0}^{\infty} a_k k x^{k-1} = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k x^{k-1} \tag{25}$$

令 $k' = k - 1$，则 $k = k' + 1$，于是

$$y' = \sum_{k'=0}^{\infty} a_{k'+1}(k'+1)x^{k'} \tag{26}$$

将傀标 k' 换为 k，则

$$y' = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1}(k+1)x^{k} \tag{27}$$

同样，(23)可以写为

$$y'' = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2}(k+1)(k+2)x^{k} \tag{28}$$

2.1.3 正则奇点邻域的级数解法

如果微分方程可以写成如下形式

$$x^2 y'' + xP(x)y' + Q(x)y = 0 \tag{29}$$

当 $x = 0$，$P(x)$ 与 $Q(x)$ 是有限的，那么 $x = 0$ 就是方程的正则奇点。可以用如下的级数展开

$$\begin{aligned} y &= x^L \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \\ y' &= x^L \sum_{k=0}^{\infty} a_k (L+k) x^{k-1} \\ y'' &= x^L \sum_{k=0}^{\infty} a_k (L+k)(L+k-1) x^{k-2} \end{aligned} \tag{30}$$

带入(29)即可。

2.2 级数解法求解谐振子

2.2.1 函数与变量的变换

由(15)，我们引入无量纲算符

$$\begin{aligned}\widehat{X} &= \beta X \\ \widehat{P} &= \frac{P}{\beta\hbar}\end{aligned} \tag{31}$$

参量 β 是具有长度的倒数的量纲，定义为

$$\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \tag{32}$$

引用 $|\xi_{\widehat{x}}\rangle$ 表示 $\widehat{X}$ 的属于本征值 $\widehat{x}$ 的本征矢：

$$\widehat{X}|\xi_{\widehat{x}}\rangle = \widehat{x}|\xi_{\widehat{x}}\rangle \tag{33}$$

正交归一关系式与封闭性关系式可以写作：

$$\langle\xi_{\widehat{x}}|\xi_{\widehat{x'}}\rangle = \delta(\widehat{x} - \widehat{x'}) \tag{34}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\widehat{x}|\xi_{\widehat{x}}\rangle\langle\xi_{\widehat{x}}| = 1 \tag{35}$$

右矢 $|\xi_{\widehat{x}}\rangle$ 显然是算符 X 的属于本征值 $\widehat{x}/\beta$ 的本征矢，当：

$$\widehat{x} = \beta x \tag{36}$$

时，右矢 $|x\rangle$ 便与右矢 $|\xi_{\widehat{x}}\rangle$ 成比例。但二者并不相等。实际上，关于右矢 $|x\rangle$ 的封闭性关系式为：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x|x\rangle\langle x| = 1 \tag{37}$$

如果在这个积分中按(36)进行变量代换，我们便得到

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}\widehat{x}}{\beta}|\widehat{x} = \beta x\rangle\langle\widehat{x} = \beta x| = 1 \tag{38}$$

与(35)比较可以看出，例如，我们可以令

$$|\widehat{x} = \beta x\rangle = \sqrt{\beta}|\xi_{\widehat{x}}\rangle \tag{39}$$

便可以使右矢 $|\xi_{\widehat{x}}\rangle$ 作为 $\widehat{x}$ 的函数是正交归一化的，因为右矢 $|x\rangle$ 作为 x 的函数是正交归一化的。

用 $|\varphi\rangle$ 表示任意右矢，则

$$\widehat{\varphi}(\widehat{x}) = \langle\xi_{\widehat{x}}|\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{\beta}}\langle x = \widehat{x}/\beta|\varphi\rangle \tag{40}$$

也就是说

$$\widehat{\varphi}(\widehat{x}) = \frac{1}{\sqrt{\beta}}\varphi(x = \widehat{x}/\beta) \tag{41}$$

于是(15)可以改写为

$$\frac{1}{2}\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\widehat{x}^2} + \widehat{x}^2\right]\widehat{\varphi}(\widehat{x}) = \varepsilon\widehat{\varphi}(\widehat{x}) \tag{42}$$

其中

$$\varepsilon = \frac{E}{\hbar\omega} \tag{43}$$

2.2.2 多项式方法

我们可以将(42)写为

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\widehat{x}^2} - (\widehat{x}^2 - 2\varepsilon)\right]\widehat{\varphi}(\widehat{x}) = 0 \tag{44}$$

考虑 $\widehat{x}$ 非常大时，$\widehat{\varphi}(\widehat{x})$ 的行为，为此，考虑以下函数

$$G_\pm(\widehat{x}) = e^{\pm\widehat{x}^2/2} \tag{45}$$

他是下列微分方程的解

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\widehat{x}^2} - (\widehat{x}^2 \pm 1)\right]G_\pm(\widehat{x}) = 0 \tag{46}$$

当 $\widehat{x}$ 趋向无穷大时

$$\widehat{x}^2 \pm 1 \sim \widehat{x}^2 \sim \widehat{x}^2 - 2\varepsilon \tag{47}$$

于是方程(44)和(46)渐近于同一形式。从物理上看，有意义的只是处处有界的函数 $\widehat{\varphi}(\widehat{x})$，即行为与 $e^{-\widehat{x}^2/2}$ 相同的那些解，于是我们令

$$\widehat{\varphi}(\widehat{x}) = e^{-\widehat{x}^2/2} h(\widehat{x}) \tag{48}$$

将(48)带入(44)，得到

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\widehat{x}^2} h(\widehat{x}) - 2\widehat{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\widehat{x}} h(\widehat{x}) + (2\varepsilon - 1) h(\widehat{x}) = 0 \tag{49}$$

H 的本征函数具有确定的宇称，因为势 $V(x)$ 为一个偶函数，因此(15)的解可以在偶函数类或奇函数类中去找。由于 $e^{-\widehat{x}^2/2}h(\widehat{x})$ 是偶函数，因此，我们令

$$h(\widehat{x}) = \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m} \widehat{x}^{2m+p} \tag{50}$$

其中 a_0 不为零。同时

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\widehat{x}} h(\widehat{x}) = \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m}(2m+p) a_{2m} \widehat{x}^{2m+p-1} \tag{51}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\widehat{x}^2} h(\widehat{x}) = \sum_{m=0}^{\infty} a_{2m}(2m+p)(2m+p-1) a_{2m} \widehat{x}^{2m+p-2} \tag{52}$$

现在将(50)(51)(52)代入(49)。对于一般项 $\widehat{x}^{2m+p}$：

$$(2m+p+2)(2m+p+1) a_{2m+2} = (4m+2p-2\varepsilon+1) a_{2m} \tag{53}$$

得到递推公式

$$a_{2m+2} = \frac{4m+2p-2\varepsilon+1}{(2m+p+2)(2m+p+1)} a_{2m} \tag{54}$$

最低次项是 $\widehat{x}^{p-2}$，则

$$p(p-1)a_0 = 0 \tag{55}$$

于是 $p=0$[因而 $\varphi(x)$ 是偶函数] 或 $p=1$[因而 $\varphi(x)$ 是奇函数]。

这样一来，对于任意 ε，我们得到子方程(49)的两个线性独立的幂级数解，分别对应于 $p=0$ 和 $p=1$。

如果级数是无穷级数，从(54)可以看出

$$\frac{a_{2m+2}}{a_{2m}} \overset{m\to\infty}{\sim} \frac{1}{m} \tag{56}$$

另一方面，函数 $e^{\lambda\widehat{x}^2}$ 的幂级数展开为

$$e^{\lambda\widehat{x}^2} = \sum_{m=0}^{\infty} b_{2m}\widehat{x}^{2m} \tag{57}$$

其中

$$b_{2m} = \frac{\lambda^m}{m!} \tag{58}$$

我们有

$$\frac{b_{2m+2}}{b_{2m}} \overset{m\to\infty}{\sim} \frac{\lambda}{m} \tag{59}$$

可以看出该级数的渐近行为与 $e^{\lambda\widehat{x}^2}$ 类似，因而当 $\widehat{x} \to \infty$ 时，$|\widehat{\varphi}(\widehat{x})|$ 并不是有界的，这样的解没有物理意义，应该舍去。

现在只剩下一种情况，那就是对于 m 的某一数值 m_0，(54)的分子等于零，这样，我们便有：

$$\begin{cases} a_{2m} \neq 0 & \text{若 } m \leqslant m_0 \\ a_{2m} = 0 & \text{若 } m \geqslant m_0 \end{cases} \tag{60}$$

此时 $h(\widehat{x})$ 的幂级数退化为 $2m_0 + p$ 次的多项式。$\widehat{\varphi}(\widehat{x})$ 在无穷远处的行为决定于指数函数 $e^{-\widehat{x}^2/2}$，于是 $\widehat{\varphi}(\widehat{x})$ 在物理上是合理的 (平方可积)。

$m = m_0$ 时(54)的分子为零，这要求下列条件成立

$$2\varepsilon = 2(2m_0 + p) + 1 \tag{61}$$

如果我们令

$$2m_0 + p = n \tag{62}$$

便可以将(61)写作

$$\varepsilon = \varepsilon_n = n + \frac{1}{2} \tag{63}$$

式中 n 为零或任意正整数，这便引入了谐振子能量的量子化，因为(43)改写

为

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{64}$$

同时本征函数可以写为：

$$\widehat{\varphi}_n(\widehat{x}) = e^{-\widehat{x}^2/2}h_n(\widehat{x}) \tag{65}$$

式中 $h_n(\widehat{x})$ 是一个 n 次多项式。根据(50)，n 为偶数时，$h_n(\widehat{x})$ 为偶函数；n 为奇数时，$h_n(\widehat{x})$ 为奇函数。

基态对应于 $n = 0$，即 $m_0 = p = 0$，这时 $h_n(\widehat{x})$ 是一个常数，于是

$$\widehat{\varphi}_n(\widehat{x}) = a_0 e^{-\widehat{x}^2/2} \tag{66}$$

为使 $\widehat{\varphi}_n(\widehat{x})$ 对于 $\widehat{x}$ 归一化，只需取

$$a_0 = \pi^{-1/4} \tag{67}$$

再利用(41)，得

$$\varphi_0(x) = \left(\frac{\beta^2}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\beta^2 x^2/2} \tag{68}$$

对于第一激发态，$E_1 = 3/2\hbar\omega$ 对应于 $n = 1$，即 $m_0 = 0, p = 1$，同上可以看出

$$\varphi_1(x) = \left(\frac{4\beta^6}{\pi}\right)^{1/4} x e^{-\beta^2 x^2/2} \tag{69}$$

对于任意的 n，$h_n(\widehat{x})$ 就是方程(49)的多项式解，考虑到量子化条件(63)，我们可以将方程写作

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\widehat{x}^2} - 2\widehat{x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\widehat{x}} + 2n\right] h_n(\widehat{x}) = 0 \tag{70}$$

厄米多项式的定义式为

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} - 2z\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} + 2n\right] H_n(z) = 0 \tag{71}$$

我们可以看出，(70)正是厄米多项式 $H_n(\widehat{x})$ 所满足的微分方程。因此多项式 $h_n(\widehat{x})$ 正比于 $H_n(\widehat{x})$，比例因子可以通过 $\widehat{\varphi}(\widehat{x})$ 的归一化来确定。

3　升降算符法

本章我们采用另一种方法，升降算符法再次处理谐振子的问题。

3.1　符号

3.1.1　算符 $\widehat{X}$ 和 $\widehat{P}$

观察算符 X, P 是有量纲的，我们可以定义如下没有量纲的算符：

$$
\begin{aligned}
\widehat{X} &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X \\
\widehat{P} &= \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P
\end{aligned} \tag{72}
$$

利用这两个新算符，可以将对易关系式写作

$$
[\widehat{X}, \widehat{P}] = \mathrm{i} \tag{73}
$$

而哈密顿算符为

$$
H = \hbar\omega \widehat{H} \tag{74}
$$

其中

$$
\widehat{H} = \frac{1}{2}(\widehat{X}^2 + \widehat{P}^2) \tag{75}
$$

于是本征方程为

$$
\widehat{H}|\varphi_\nu^i\rangle = \varepsilon_\nu |\varphi_\nu^i\rangle \tag{76}
$$

指标 ν 即可属于离散集合也可属于连续集合，辅助指标 i 用来区别属于同一本征值 ε_ν 的若干互相正交的本征矢。

3.1.2　算符 $a, a^\dagger$ 以及 N

由于 $\widehat{X}$ 和 $\widehat{P}$ 是不可对易的算符，因此 $\widehat{X}^2 + \widehat{P}^2$ 并不等于 $(\widehat{X} - \mathrm{i}\widehat{P})(\widehat{X} + \mathrm{i}\widehat{P})$。但是，我们只要引入 $\widehat{X} - \mathrm{i}\widehat{P}$ 和与 $\widehat{X} + \mathrm{i}\widehat{P}$ 成正比的算符，就可以使问题大大简化。

因此，令

$$
a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\widehat{X} + \mathrm{i}\widehat{P}) \tag{77a}
$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\widehat{X} - \mathrm{i}\widehat{P}) \tag{77b}$$

反过来：

$$\widehat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \tag{78a}$$

$$\widehat{P} = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \tag{78b}$$

a 与 $a^\dagger$ 由于因子 i，不是厄米算符，他们互为伴随算符。

a 与 $a^\dagger$ 的对易子为：

$$\begin{aligned}[a, a^\dagger] &= \frac{1}{2}[\widehat{X} + \mathrm{i}\widehat{P}, \widehat{X} - \mathrm{i}\widehat{P}] \\ &= \frac{\mathrm{i}}{2}[\widehat{P}, \widehat{X}] - \frac{\mathrm{i}}{2}[\widehat{X}, \widehat{P}] \\ &= 1\end{aligned} \tag{79}$$

接下来推导几个重要公式。首先计算 $a^\dagger a$

$$\begin{aligned}a^\dagger a &= \frac{1}{2}(\widehat{X} - \mathrm{i}\widehat{P})(\widehat{X} + \mathrm{i}\widehat{P}) \\ &= \frac{1}{2}(\widehat{X}^2 + \widehat{P}^2 + \mathrm{i}\widehat{X}\widehat{P} - \mathrm{i}\widehat{P}\widehat{X}) \\ &= \frac{1}{2}(\widehat{X}^2 + \widehat{P}^2 - 1)\end{aligned} \tag{80}$$

与(75)比较，可以看出

$$\widehat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}(\widehat{X} - \mathrm{i}\widehat{P})(\widehat{X} + \mathrm{i}\widehat{P}) + \frac{1}{2} \tag{81}$$

同样可以得出

$$\widehat{H} = aa^\dagger - + \frac{1}{2} \tag{82}$$

再引入一个算符 N，定义为

$$N = a^\dagger a \tag{83}$$

这是一个厄米算符，此外，根据(81)

$$\widehat{H} = N + \frac{1}{2} \tag{84}$$

由此可见，$\widehat{H}$ 的本征矢都是 N 的本征矢。

最后再来计算 N 与 $a, a^\dagger$ 的对易子

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger [a, a] + [a^\dagger, a] a = -a \tag{85a}$$

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger [a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger] a = a^\dagger \tag{85b}$$

我们可以把(76)换成 N 的本征值方程

$$N|\varphi_\nu^i\rangle = \nu|\varphi_\nu^i\rangle \tag{86}$$

这个方程一旦解出，我们将会知道 N 的本征矢 $|\varphi_\nu^i\rangle$ 也是 H 的对应于本征值 $E_\nu = (\nu + 1/2)\hbar\omega|\varphi_\nu^i\rangle$ 的本征矢：

$$H|\varphi_\nu^i\rangle = (\nu + 1/2)\hbar\omega|\varphi_\nu^i\rangle \tag{87}$$

3.2 谱的确定

3.2.1 引理 1-N 的本征值性质

算符 N 的本征值 ν 都是正数或零。

矢量 $a|\varphi_\nu^i\rangle$ 的模的平方为正数或零，即

$$\|a|\varphi_\nu^i\rangle\|^2 = \langle\varphi_\nu^i|a^\dagger a|\varphi_\nu^i\rangle \geqslant 0 \tag{88}$$

根据(83)，便有

$$\langle\varphi_\nu^i|a^\dagger a|\varphi_\nu^i\rangle = \langle\varphi_\nu^i|N|\varphi_\nu^i\rangle = \nu\langle\varphi_\nu^i|\varphi_\nu^i\rangle \tag{89}$$

由于 $\langle\varphi_\nu^i|\varphi_\nu^i\rangle$ 是正的，便知

$$\nu \geqslant 0 \tag{90}$$

3.2.2 引理 2-矢量 $a|\varphi_\nu^i\rangle$ 的性质

假设 $|\varphi_\nu^i\rangle$ 是 N 的非零本征矢，属于本征值 ν。

——若 $\nu = 0$，则右矢 $a|\varphi_{\nu=0}^i\rangle$ 为零。

——若 $\nu > 0$，则右矢 $a|\varphi_\nu^i\rangle$ 是 N 的非零本征矢，属于本征值 $\nu - 1$。

(1) 根据(89)，如果 $\nu=0$，那么 $a|\varphi_\nu^i\rangle$ 的模的平方等于零，即该矢量为零。因为，如果 $\nu=0$ 是 N 的本征值，那么，属于这个本征值的任何本征矢 $|\varphi_0^i\rangle$ 都满足下式：

$$a|\varphi_0^i\rangle = 0 \tag{91}$$

考虑一个矢量 $|\varphi\rangle$，假设他满足

$$a|\varphi\rangle = 0 \tag{92}$$

用 $a^\dagger$ 左乘此式的两端有：

$$a^\dagger a|\varphi\rangle = N|\varphi\rangle = 0 \tag{93}$$

因而，满足(92)的每一个矢量都是 N 的属于本征值 $\nu=0$ 的本征矢。

(2) 现在假设 ν 确定地为正数，根据(89)，既然模的平方不等于零，那么，$a|\varphi_\nu^i\rangle$ 也不等于零。

我们将算符关系式(85a)应用于矢量 $|\varphi_\nu^i\rangle$：

$$\begin{aligned}
[N,a]|\varphi_\nu^i\rangle &= -a|\varphi_\nu^i\rangle \\
Na|\varphi_\nu^i\rangle &= aN|\varphi_\nu^i\rangle - a|\varphi_\nu^i\rangle \\
&= a\nu|\varphi_\nu^i\rangle - a|\varphi_\nu^i\rangle \\
N[a|\varphi_\nu^i\rangle] &= (\nu-1)[a|\varphi_\nu^i\rangle]
\end{aligned} \tag{94}$$

于是就证明了 $a|\varphi_\nu^i\rangle$ 是 N 的本征矢，属于本征值 $\nu-1$。

3.2.3 引理 3-矢量 $a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle$ 的性质

假设 $|\varphi_\nu^i\rangle$ 是 N 的一个非零本征矢，属于本征值 ν。

——$a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle$ 永远不为零。

——$a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle$ 是 N 的本征矢，属于本征值 $\nu+1$。

(1) 利用(79)(83)很容易计算矢量 $a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle$ 的模的平方

$$\begin{aligned}
\|a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle\|^2 &= \langle\varphi_\nu^i|aa^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle \\
&= \langle\varphi_\nu^i|(N+1)|\varphi_\nu^i\rangle \\
&= (\nu+1)\langle\varphi_\nu^i|\varphi_\nu^i\rangle
\end{aligned} \tag{95}$$

根据引理 1，由于 ν 是正数或零，于是右矢 $a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle$ 的模永远不为零，故该右矢也永远不为零。

(2) 类似引理 2 的证明，要证明 $a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle$ 是 N 的本征矢，只需利用算符关系式(85b)：

$$
\begin{aligned}
[N, a^\dagger]|\varphi_\nu^i\rangle &= a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle \\
Na^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle = a^\dagger N|\varphi_\nu^i\rangle + a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle &= (\nu+1)a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle
\end{aligned} \tag{96}
$$

3.2.4 N 的谱由非负整数构成

我们考虑 N 的任意一个本征值 ν，以及与他对应的非零本征矢 $|\varphi_\nu^i\rangle$。

假设 ν 不是整数，我们总能找到这样的整数 $n \geqslant 0$，使得

$$n < \nu < n+1 \tag{97}$$

我们再来考虑下面的矢量序列

$$|\varphi_\nu^i\rangle, a|\varphi_\nu^i\rangle, \cdots, a^n|\varphi_\nu^i\rangle \tag{98}$$

根据引理 2，这个序列中的每一个矢量 $a^p|\varphi_\nu^i\rangle(0 \leqslant p \leqslant 0)$ 都不为零，而且是 N 的本征矢，属于本征值 $\nu - p$，假设根据 $|\varphi_\nu^i\rangle$ 不为零，$a|\varphi_\nu^i\rangle$ 也不为零，他对应于 N 的本征值 $\nu-1, \cdots; a^{p-1}|\varphi_\nu^i\rangle$ 是 N 的本征矢，属于本征值 $\nu-p+1$，这是一个严格的正数，因为 $p \leqslant n$ 而且 $\nu > n$，将 a 作用于 $a^{p-1}|\varphi_\nu^i\rangle$ 便可得到 $a^p|\varphi_\nu^i\rangle$。

现在将算符 a 作用于右矢 $a^n|\varphi_\nu^i\rangle$。根据(97)，$\nu - n > 0$，故将 a 作用于 $a^n|\varphi_\nu^i\rangle$；此外，根据引理 2，$a^{n+1}|\varphi_\nu^i\rangle$ 也是 N 的本征矢，属于本征值 $\nu-n-1$，根据(97)，这是一个严格的负数。因而，如果 ν 不是整数，我们便可以构成 N 的一个非零本征矢，他所对应的本征值是严格的负数。根据引理 1，这是不可能的，因此，我们必须放弃 ν 不是整数的假设。

如果 n 是正整数或零，而

$$\nu = n \tag{99}$$

在上述矢量序列中，$a^n|\varphi_\nu^i\rangle$ 不为零，而且是 N 的本征矢，属于本征值零。

于是，根据引理 2，我们有

$$a^{n+1}|\varphi_\nu^i\rangle = 0 \tag{100}$$

由此可见，若 n 是整数，则将算符 a 迭次作用于 $|\varphi_\nu^i\rangle$ 所得到的矢量序列是有限的；因此，我们永远不可能得到 N 的属于负本征值的非零本征矢。

归结起来，ν 只能是非负整数 n。

现在我们便可以用引理 3 证明：N 的谱实际上包含全体正整数和零。在上面我们已经构成了 N 的一个本征矢 $(a^n|\varphi_\nu^i\rangle)$，他属于本征值零；只需将算符 $(a^\dagger)^k$ 作用于这个矢量，便可以得到 N 的属于本征值 k 的本征矢，这里的 k 是一个任意的正整数。

如果参考(87)，我们便可以肯定 H 的本征值应为：

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{101}$$

其中 $n = 0, 1, 2, \cdots$，由此可见，在量子力学中，谐振子的能量是量子化的，我们得到了与多项式解法相同的结论。

我们还要对算符 a 和 $a^\dagger$ 进行解释。将算符 a 作用于 H 的属于本征值 $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ 的本征矢 $|\varphi_\nu^i\rangle$，我们便可以得到属于本征值 $E_{n-1} = (n + 1/2)\hbar\omega - \hbar\omega$ 的一个本征矢，$a^\dagger$ 的作用同样方式给出能量 $E_{n+1} = (n + 1/2)\hbar\omega + \hbar\omega$。

所以我们称 a 为湮没算符，$a^\dagger$ 为产生算符，他们对 N 的本征矢的作用是使得一个能量子 $\hbar\omega$ 消失或产生。

3.2.5 本征值的简并度

我们将证明，一维谐振子的能级是非简并的。根据引理 2，N 的与本征值 $n = 0$ 相联系的所有本征态，都应满足下列方程

$$a|\varphi_0^i\rangle = 0 \tag{102}$$

因而，为了考虑能级 E_0 的简并度，只需考虑满足(102)的线性无关的右矢有多少个即可。

利用 a 的定义以及关系式(72)，可将(102)写成下列形式：

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}X+\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{m\hbar\omega}}P\right]|\varphi_0^i\rangle=0 \tag{103}$$

在 $|x\rangle$ 表象下，此式变成

$$\left(\frac{m\omega}{\hbar}x+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\varphi_0^i(x)=0 \tag{104}$$

式中

$$\varphi_0^i(x)=\langle x|\varphi_0^i\rangle \tag{105}$$

这个一阶微分方程的通解为

$$\varphi_0^i(x)=ce^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \tag{106}$$

因此，方程(104)的所有解彼此成比例，这就是说，除一个倍乘因子以外，满足(102)的右矢 $|\varphi_0\rangle$ 只有一个；可见基态能级 $E_0=\hbar\omega/2$ 是非简并的。

接下来我们用递推的方法证明所有其他能级也都是非简并的。

为此，只需再证明：如果能级 $E_n=(n+1/2)\hbar\omega$ 是非简并的，则能级 $E_{n+1}=(n+1+1/2)\hbar\omega$ 也是非简并的。因此，我们假设，除一个倍乘因子以外，只有一个右矢 $|\varphi_n\rangle$ 可以满足关系：

$$N|\varphi_n\rangle=n|\varphi_n\rangle \tag{107}$$

再考虑对应于本征值 $n+1$ 的一个本征矢 $|\varphi_{n+1}^i\rangle$

$$N|\varphi_{n+1}^i\rangle=(n+1)|\varphi_{n+1}^i\rangle \tag{108}$$

我们知道，右矢 $a|\varphi_{n+1}^i\rangle$ 不为零，而且是 N 的本征矢，属于本征值 n。根据假设，这个本征值是非简并的，因而存在一个数 c^i，使得

$$a|\varphi_{n+1}^i\rangle=c^i|\varphi_n^i\rangle \tag{109}$$

将算符 $a^\dagger$ 作用于此式两端可将 $|\varphi_{n+1}^i\rangle$ 解出来

$$a^\dagger a|\varphi_{n+1}^i\rangle=c^i a^\dagger|\varphi_n^i\rangle \tag{110}$$

考虑到(83)(108)，也就是

$$|\varphi_{n+1}^i\rangle = \frac{c^i}{n+1} a^\dagger |\varphi_n\rangle \tag{111}$$

我们已经知道 $a^\dagger|\varphi_n\rangle$ 是 N 的本征矢属于本征值 $(n+1)$；我们看到，属于本征值 $(n+1)$ 的所有的右矢 $|\varphi_{n+1}^i\rangle$ 都与 $a^\dagger|\varphi_n\rangle$ 成比例；因而他们也互相成比例，这就是说，本征值 $(n+1)$ 是非简并的。

3.3 哈密顿算符的本征态

我们承认 N 和 H 都是观察算符，也就是说，他们各自的本征矢的集合都构成一维问题中的一个粒子的态空间 $\mathscr{E}_x$ 的一个基。由于 N 的每一个本征值都是非简并的，故 N(或 H) 本身就构成 $\mathscr{E}_x$ 空间的一个 CSCO。

3.3.1 基矢量表为 $|\varphi_0\rangle$ 的函数

与 $n=0$ 相联系的矢量 $|\varphi_0\rangle$ 是 $\mathscr{E}_x$ 空间的矢量，他满足关系

$$a|\varphi_0\rangle = 0 \tag{112}$$

除倍乘因子以外，这个矢量是确定的，我们假设 $|\varphi_0\rangle$ 已归一化，则他的不确定性只限于一个形如 $e^{i\theta}$ 的全局相位因子。

根据引理 3，对应于 $n=1$ 的矢量 $|\varphi_1\rangle$ 与矢量 $a^\dagger|\varphi_0\rangle$ 成比例：

$$|\varphi_1\rangle = c_1 a^\dagger |\varphi_0\rangle \tag{113}$$

为了确定 c_1，我们规定 $|\varphi_1\rangle$ 已归一化，并选择 $|\varphi_1\rangle$ 的相位使得 c_1 为正实数。根据(113)，$|\varphi_1\rangle$ 的模平方为：

$$\begin{aligned}\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle &= |c_1|^2\langle\varphi_0|aa^\dagger|\varphi_0\rangle \\ &= |c_1|^2\langle\varphi_0|(a^\dagger a+1)|\varphi_0\rangle\end{aligned} \tag{114}$$

由于 $|\varphi_0\rangle$ 是 $N=a^\dagger a$ 的属于本征值零的已归一的本征矢，故得

$$\langle\varphi_1|\varphi_1\rangle = |c_1|^2 = 1 \tag{115}$$

按照上面相位的规定，应取 $c_1 = 1$，因而

$$|\varphi_1\rangle = a^\dagger|\varphi_0\rangle \tag{116}$$

同样的，我们可以从 $|\varphi_1\rangle$ 出发构建 $|\varphi_2\rangle$

$$|\varphi_2\rangle = c_2 a^\dagger|\varphi_1\rangle \tag{117}$$

于是

$$\langle\varphi_2|\varphi_2\rangle = 2|c_2|^2 = 1 \tag{118}$$

便可得

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}a^\dagger|\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger)^2|\varphi_0\rangle \tag{119}$$

这种做法很容易推广。如果已知归一化的 $|\varphi_{n-1}\rangle$，那么，已归一化的矢量 $|\varphi_n\rangle$ 就可以写作

$$|\varphi_n\rangle = c_n a^\dagger|\varphi_{n-1}\rangle \tag{120}$$

由于

$$\begin{aligned}\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle &= |c_n|^2\langle\varphi_{n-1}|aa^\dagger|\varphi_{n-1}\rangle \\ &= n|c_n|^2 = 1\end{aligned} \tag{121}$$

按上面我们相位的规定，应该取

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \tag{122}$$

相继选择相位，我们可以从 $|\varphi_0\rangle$ 出发得到所有的 $|\varphi_n\rangle$

$$\begin{aligned}|\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}}a^\dagger|\varphi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\frac{1}{\sqrt{n-1}}(a^\dagger)^2|\varphi_{n-2}\rangle = \cdots \\ &= \frac{1}{\sqrt{n}}\frac{1}{\sqrt{n-1}}\cdots\frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle\end{aligned} \tag{123}$$

或写作

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|\varphi_0\rangle \tag{124}$$

3.3.2 正交归一关系式和封闭性关系式

H 既然是厄米算符，那么，与不同的 n 值对应的那些右矢 $|\varphi_n\rangle$ 必是互相正交的；此外，由于每个右矢都已归一化，因此他们满足正交归一关系式：

$$\langle\varphi_{n'}|\varphi_n\rangle = \delta_{nn'} \tag{125}$$

另一方面，H 又是一个观察算符，所以全体 $|\varphi_n\rangle$ 的集合构成 $\mathscr{E}_x$ 空间中的一个基，这一点由封闭性关系

$$\sum_n |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| = 1 \tag{126}$$

来表示。

3.3.3 各算符的作用

观察算符 X 和 P 都是算符 a 和 $a^\dagger$ 的线性组合。因而所有的物理量都可以表示为 a 和 $a^\dagger$ 的函数。他们在表象 $|\varphi_n\rangle$ 中各基矢量的作用又下列公式表示

$$a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle \tag{127a}$$

$$a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle \tag{127b}$$

从上式出发，利用(72)(77)，我们可以得 $X|\varphi_n\rangle$ 与 $P|\varphi_n\rangle$ 的表示式

$$\begin{aligned} X|\varphi_n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)|\varphi_n\rangle \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle + \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle] \end{aligned} \tag{128a}$$

$$\begin{aligned} P|\varphi_n\rangle &= \sqrt{m\hbar\omega}\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)|\varphi_n\rangle \\ &= \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}[\sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle + \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle] \end{aligned} \tag{128b}$$

从而，算符 $a, a^\dagger, X, P$ 在表象 $|\varphi_n\rangle$ 中的矩阵元分别为

$$\langle\varphi_{n'}|a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1} \tag{129a}$$

$$\langle\varphi_{n'}|a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} \tag{129b}$$

$$\langle\varphi_{n'}|X|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} + \sqrt{n}\delta_{n',n-1}] \tag{129c}$$

$$\langle\varphi_{n'}|P|\varphi_n\rangle = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}[\sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} - \sqrt{n}\delta_{n',n-1}] \tag{129d}$$

3.4 与定态相联系的波函数

现在采用 $|x\rangle$ 表象。现在已经求出函数 $\varphi_0(x)$，他表示基态 $|\varphi_0\rangle$

$$\varphi_0(x) = \langle x|\varphi_0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \tag{130}$$

指数函数前的常数保证归一化。

为了求得与谐振子的其他定态相联系的波函数，只需利用(124)与以下事实：在表象 $|x\rangle$ 中，X 表示用 x 去倍乘，而 P 相当于 $\dfrac{\hbar}{\mathrm{i}}\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$，于是

$$\begin{aligned}\varphi_n(x) = \langle x|\varphi_n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} = \langle x|(a^\dagger)^n|\varphi_n\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]^n \varphi_0(x)\end{aligned} \tag{131}$$

或写作

$$\varphi_n(x) = \left[\frac{1}{2^n n!}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^n\right]^{1/2}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left[\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]^n e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \tag{132}$$

$\varphi_n(x)$ 就是函数 $e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}$ 与一个次数为 n，宇称为 $(-1)^n$ 的多项式乘积，这个多项式就是厄米多项式。

4　各向同性的三维谐振子

4.1　哈密顿算符

考虑一个无自旋粒子，质量为 m，可在三维空间中运动，受向心力的作用，力的大小正比于粒子至 O 点的距离

$$F = -kr \tag{133}$$

这个力场下的势能

$$V(r) = \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \tag{134}$$

式中角频率为

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \tag{135}$$

于是，经典哈密顿函数为

$$\mathscr{H}(r,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 \tag{136}$$

根据量子化规则，哈密顿算符为 i

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 R^2 \tag{137}$$

由于哈密顿算符与时间无关，我们将解他的本征值方程

$$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle \tag{138}$$

这里的 $|\varphi\rangle$ 属于三维空间中运动的粒子的态空间 $\mathscr{E}_r$。

由于 V(r) 实际上只依赖粒子到原点的距离，所以这个谐振子是各向同性的，势能可以写作

$$V(r) = \frac{m}{2}(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) \tag{139}$$

4.2 直角坐标系下变量的分离

我们将态空间 $\mathscr{E}_r$ 看做一个张量积

$$\mathscr{E}_r = \mathscr{E}_x \otimes \mathscr{E}_y \otimes \mathscr{E}_z \tag{140}$$

哈密顿算符还可以写作

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(X^2 + Y^2 + Z^2) \\ &= H_x + H_y + H_z \end{aligned} \tag{141}$$

H_x, H_y, H_z 互相对易，所以，其中的每一个都与他们的总和 H 对易。因此，只要解出本征方程(138)，我们可寻求 H 的诸本征矢，他们也是 H_x, H_y, H_z 的本征矢。我们已经知道 $\mathscr{E}_x$ 中 H_x 的本征矢和本征值，以及其他两个空间

$$H_x|\varphi_{n_x}\rangle = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|\varphi_{n_x}\rangle \quad |\varphi_{n_x}\rangle \in \mathscr{E}_x \tag{142a}$$

$$H_y|\varphi_{n_y}\rangle = \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|\varphi_{n_y}\rangle \quad |\varphi_{n_y}\rangle \in \mathscr{E}_y \tag{142b}$$

$$H_z|\varphi_{n_z}\rangle = \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|\varphi_{n_z}\rangle \quad |\varphi_{n_z}\rangle \in \mathscr{E}_z \tag{142c}$$

共同的本征矢为

$$|\varphi_{n_x,n_y,n_z}\rangle = |\varphi_{n_x}\rangle|\varphi_{n_y}\rangle|\varphi_{n_z}\rangle \tag{143}$$

根据(141)(142)

$$H|\varphi_{n_x,n_y,n_z}\rangle = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega|\varphi_{n_x,n_y,n_z}\rangle \tag{144}$$

这就是说，H 的本征矢就是 H_x, H_y, H_z 各种的本征矢的张量积，而 H 的本征值就是这三个算符的本征值之和。

根据(144)，各向同性的三维谐振子的能级具有下列形式

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega \tag{145}$$

其中，n 是 0 或正整数。

现在引用三组产生、湮没算符

$$a_x = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P_x \quad a_x^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}X - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P_x \tag{146a}$$

$$a_y = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}Y + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P_y \quad a_y^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}Y - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P_y \tag{146b}$$

$$a_z = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}Z + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P_z \quad a_z^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}Z - \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}P_z \tag{146c}$$

六个算符之间的非零对易子只是

$$[a_x, a_x^\dagger] = [a_y, a_y^\dagger] = [a_z, a_z^\dagger] = 1 \tag{147}$$

算符 $a_x, a_x^\dagger$ 对态矢量 $|\varphi_{n_x,n_y,n_z}\rangle$ 的作用为

$$\begin{aligned} a_x|\varphi_{n_x,n_y,n_z}\rangle &= (a_x|\varphi_{n_x}\rangle)|\varphi_{n_y}\rangle|\varphi_{n_z}\rangle \\ &= \sqrt{n_x}|\varphi_{n_x-1}\rangle|\varphi_{n_y}\rangle|\varphi_{n_z}\rangle \\ &= \sqrt{n_x}|\varphi_{n_x-1,n_y,n_z}\rangle \end{aligned} \tag{148a}$$

$$\begin{aligned} a_x^\dagger|\varphi_{n_x,n_y,n_z}\rangle &= (a_x^\dagger|\varphi_{n_x}\rangle)|\varphi_{n_y}\rangle|\varphi_{n_z}\rangle \\ &= \sqrt{n_x+1}|\varphi_{n_x+1}\rangle|\varphi_{n_y}\rangle|\varphi_{n_z}\rangle \\ &= \sqrt{n_x+1}|\varphi_{n_x+1,n_y,n_z}\rangle \end{aligned} \tag{148b}$$

我们又知道

$$|\varphi_{n_x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x!}}(a_x^\dagger)^{n_x}|\varphi_0\rangle \tag{149}$$

其中 $|\varphi_0\rangle$ 是 $\mathscr{E}_x$ 中的右矢，他满足条件

$$a_x|\varphi_0\rangle = 0 \tag{150}$$

$|\varphi_{n_y}\rangle$ 和 $|\varphi_{n_z}\rangle$ 分别在空间 $\mathscr{E}_y$ 和 $\mathscr{E}_z$ 中也有类型的关系式，因此根据(143)，有

$$|\varphi_{n_x,n_y,n_z}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x!n_y!n_z!}}(a_x^\dagger)^{n_x}(a_y^\dagger)^{n_y}(a_z^\dagger)^{n_z}|\varphi_{0,0,0}\rangle \tag{151}$$

式中 $|\varphi_{0,0,0}\rangle$ 是三个一维谐振子的基态的张量积，因而，他满足

$$a_x|\varphi_{0,0,0}\rangle = a_y|\varphi_{0,0,0}\rangle = a_z|\varphi_{0,0,0}\rangle \tag{152}$$

最后

$$\langle r|\varphi_{0,0,0}\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{3/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2+z^2)} \tag{153}$$

4.3 能级的简并度

H 不能单独构成一个 CSCO，因为能级 E_n 是简并的。实际上，假设我们选定了 H 的一个本征值 $E_n = (n+3/2)\hbar\omega$；这等于说已将 n 取定为某一个非负整数值。在基 $|\varphi_{n_x,n_y,n_z}\rangle$ 中，凡是满足条件

$$n_x + n_y + n_z = n \tag{154}$$

的所有右矢都是 H 的属于本征值 E_n 的本征矢。

如果我们选定 n_x，我们便有

$$n_y + n_z = n - n_x \tag{155}$$

于是，数值 n_y, n_z 有 $(n - n_x + 1)$ 个可能性

$$n_y, n_z = 0, n-n_x, 1, n-n_x-1, \cdots, n-n_x, 0 \tag{156}$$

因此，简并度为

$$g_n = \sum_{n_x=0}^{n} (n - n_x + 1) \tag{157}$$

不难算出

$$g_n = (n+1)\sum_{n_x=0}^{n} 1 - \sum_{n_x=0}^{n} n_x = \frac{(n+1)(n+2)}{2} \tag{158}$$

5　二维谐振子

5.1　量子化

5.1.1　经典力学的处理

如果粒子的势能只依赖于 x 和 y，这种情况就退化为二维问题。我们假设这个势能可以写作

$$V(x,y)=\frac{\mu}{2}\omega^2(x^2+y^2) \tag{159}$$

式中，μ 是粒子的质量，ω 是一常数，于是，体系的哈密顿函数为

$$\mathscr{H}=\mathscr{H}_{xy}+\mathscr{H}_z \tag{160}$$

其中

$$\begin{aligned}\mathscr{H}_{xy}&=\frac{1}{2\mu}(p_x^2+p_y^2)+\frac{1}{2}\mu\omega^2(x^2+y^2)\\ \mathscr{H}_z&=\frac{1}{2\mu}p_z^2\end{aligned} \tag{161}$$

5.1.2　量子化处理

于是

$$H|\varphi\rangle=(H_{xy}+H_z)|\varphi\rangle \tag{162}$$

其中

$$H_{xy}=\frac{P_x^2+P_y^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2(X^2+Y^2) \tag{163a}$$

$$H_z=\frac{P_z^2}{2\mu} \tag{163b}$$

我们知道，可以选择一个由 H 的形如

$$|\varphi\rangle=|\varphi_{xy}\rangle\otimes|\varphi_z\rangle \tag{164}$$

的本征矢所构成的基：

$$H_{xy}|\varphi_{xy}\rangle=E_{xy}|\varphi_{xy}\rangle \tag{165}$$

$$H_z|\varphi_z\rangle=E_z|\varphi_z\rangle \tag{166}$$

因此，总能量为

$$E = E_{xy} + E_z \tag{167}$$

但是，(166)所确定的态就是一维问题中一个自由粒子的定态，此方程可以解出

$$\langle z|\varphi_z\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\mathrm{i}p_z z/\hbar} \tag{168}$$

而且

$$E_z = \frac{p_z^2}{2\mu} \tag{169}$$

于是问题归结为求方程(165)的解，即求一个二维谐振子的诸定态及对应的能量。

5.2 将定态按量子数 n_x 与 n_y 分类

可以将算符 H_{xy} 写作

$$H_{xy} = H_x + H_y \tag{170}$$

这里 H_x, H_y 为

$$\begin{aligned} H_x &= \frac{P_x^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 X^2 \\ H_y &= \frac{P_y^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 Y^2 \end{aligned} \tag{171}$$

因此，可将 H_{xy} 的本征态取

$$|\varphi_{n_x,n_y}\rangle = |\varphi_{n_x}\rangle \otimes |\varphi_{n_y}\rangle \tag{172}$$

对应能量为

$$\begin{aligned} E_{xy} &= \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \\ &= (n_x + n_y + 1)\hbar\omega \end{aligned} \tag{173}$$

根据一维谐振子的性质，在空间 $\mathscr{E}_x$ 在 E_x 是非简并的；在空间 $\mathscr{E}_y$ 在 E_y 是非简并的。因此，对于每一对数 n_x, n_y，在空间 $\mathscr{E}_{xy}$ 中都有一个唯一的矢量

$|\varphi_{n_x,n_y}\rangle$ 与之对应，这就是说，H_x 和 H_y 构成 $\mathscr{E}_{xy}$ 中的 CSCO。

a_x 和 a_y 定义为

$$\begin{aligned} a_x &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta X + \mathrm{i}\frac{P_x}{\beta\hbar}\right) \\ a_y &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\beta Y + \mathrm{i}\frac{P_y}{\beta\hbar}\right) \end{aligned} \tag{174}$$

两式中

$$\beta = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \tag{175}$$

因为 a_x 与 a_y 在不同的空间 $\mathscr{E}_x$ 与 $\mathscr{E}_y$ 中起作用，所以 $a_x, a_y, a_x^\dagger, a_y^\dagger$ 这四个算符之间的不为零的对易子只有

$$[a_x, a_x^\dagger] = [a_y, a_y^\dagger] = 1 \tag{176}$$

此外，算符 N_x 和 N_y 为

$$\begin{aligned} N_x &= a_x^\dagger a_x \\ N_y &= a_y^\dagger a_y \end{aligned} \tag{177}$$

于是 H_{xy} 可以写成

$$H_{xy} = H_x + H_y = (N_x + N_y + 1)\hbar\omega \tag{178}$$

显然有

$$\begin{aligned} N_x|\varphi_{n_x,n_y}\rangle &= n_x|\varphi_{n_x,n_y}\rangle \\ N_y|\varphi_{n_x,n_y}\rangle &= n_y|\varphi_{n_x,n_y}\rangle \end{aligned} \tag{179}$$

基态 $|\varphi_{0,0}\rangle$ 由下式给出

$$|\varphi_{0,0}\rangle = |\varphi_{n_x=0}\rangle \otimes |\varphi_{n_y=0}\rangle \tag{180}$$

将算符 $a_x^\dagger$ 和 $a_y^\dagger$ 相继作用于 $|\varphi_{0,0}\rangle$，便可得态 $|\varphi_{n_x,n_y}\rangle$

$$|\varphi_{n_x,n_y}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_x!n_y!}}(a_x^\dagger)^{n_x}(a_y^\dagger)^{n_y}|\varphi_{0,0}\rangle \tag{181}$$

用 $\varphi_{n_y}(y)$ 乘 $\varphi_{n_x}(x)$，所得之积就是对应的波函数

$$\varphi_{n_x,n_y}(x,y) = \frac{\beta}{\sqrt{\pi(2)^{n_x+n_y}(n_x)!(n_y)!}}e^{-\beta^2(x^2+y^2)/2}H_{n_x}(\beta x)H_{n_y}(\beta y) \tag{182}$$

由(173)可以看出，H_{xy} 的本征值具有如下形式

$$E_{xy} = E_n = (n+1)\hbar\omega \tag{183}$$

可见在空间 $\mathscr{E}_{xy}$ 中本征值 E_n 是 $(n+1)$ 重简并的，因此 H_{xy} 本身不能单独构成一个 CSCO。而 $H_{xy}, H_x, H_{xy}, H_y, H_x, H_y$ 都是 CSCO。

5.3 将定态按角动量分类

5.3.1 算符 L_z 的意义及性质

在这个问题中，Ox 轴与 Oy 轴具有优越性，因为势能在围绕 Oz 轴的旋转中是不变的。为了更好的利用这个对称性，我们现在考虑

$$L_z = XP_y - YP_x \tag{184}$$

用 $a_x, a_x^\dagger$ 表示 X 和 P_x，同样 P_y 也可以类似表示

$$L_z = \mathrm{i}\hbar(a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_y) \tag{185}$$

利用这些算符，可将 H_{xy} 表示为

$$H_{xy} = (a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1)\hbar\omega \tag{186}$$

由于

$$\begin{aligned}
[a_x a_y^\dagger, a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y] &= a_x a_y^\dagger - a_x a_y^\dagger = 0 \\
[a_x^\dagger a_y, a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y] &= -a_x^\dagger a_y + a_x^\dagger a_y = 0
\end{aligned} \tag{187}$$

从而可以得出

$$[H_{xy}, L_z] = 0 \tag{188}$$

因此，我们要去寻找由 H_{xy} 和 L_z 的共同本征矢所构成的基。

5.3.2 右旋圆量子和左旋圆量子

我们引入两个算符 a_d, a_g

$$\begin{aligned} a_d &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - \mathrm{i}a_y) \\ a_g &= \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + \mathrm{i}a_y) \end{aligned} \tag{189}$$

将算符 a_d(或 a_g) 作用于矢量 $|\varphi_{n_x,n_y}\rangle$ 所得到的态是 $|\varphi_{n_x-1,n_y}\rangle$ 和 $|\varphi_{n_x,n_y-1}\rangle$ 的一个线性组合，也就是少了一个能量子 $\hbar\omega$ 的定态。实际上，我们将会看到，算符 a_d(或 a_g) 非常类似于算符 a_x(或 a_y)，而且我们可以将 a_d 与 a_g 分别解释为一个“右旋圆量子”与一个“左旋圆量子”的湮没算符。

$a_d, a_g, a_d^\dagger, a_g^\dagger$ 四个算符之间的不为零的对易子只有

$$[a_d, a_d^\dagger] = [a_g, a_g^\dagger] = 1 \tag{190}$$

这个关系与(176)非常相似。此外，由于

$$\begin{aligned} a_d^\dagger a_d &= \frac{1}{2}(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y - \mathrm{i}a_x^\dagger a_y + \mathrm{i}a_x a_y^\dagger) \\ a_g^\dagger a_g &= \frac{1}{2}(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + \mathrm{i}a_x^\dagger a_y - \mathrm{i}a_x a_y^\dagger) \end{aligned} \tag{191}$$

从而有

$$H_{xy} = (a_d^\dagger a_d + a_g^\dagger a_g + 1)\hbar\omega \tag{192}$$

此外，考虑(185)，还可以看出

$$L_z = \hbar(a_d^\dagger a_d - a_g^\dagger a_g) \tag{193}$$

如果引入 N_g 与 N_d

$$
\begin{aligned}
N_d &= a_d^\dagger a_d \\
N_g &= a_g^\dagger a_g
\end{aligned}
\tag{194}
$$

则(192)与(193)为

$$
\begin{aligned}
H_{xy} &= (N_d + N_g + 1)\hbar\omega \\
L_z &= \hbar(N_d - N_g)
\end{aligned}
\tag{195}
$$

5.3.3 具有完全确定的角动量的定态

现在，我们可以使用算符 a_d 和 a_g 来进行类似于上面使用 a_x 和 a_y 所做的推理。这样便可推知：算符 N_d 和 N_g 的谱由全体正整数或零构成；此外，给出了这样的一对整数 $n_d.n_g$ 便唯一的决定了算符 N_d 和 N_g 的属于这组本征值的共同本征矢

$$
|\chi_{n_d,n_g}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n_d)!(n_g)!}}(a_d^\dagger)^{n_d}(a_g^\dagger)^{n_g}|\varphi_{0,0}\rangle
\tag{196}
$$

因此 N_d 和 N_g 在空间 $\mathscr{E}_{xy}$ 中构成一个 CSCO。利用(**??**)，可以看出，矢量 $|\xi_{n_d,n_g}\rangle$ 也是算符 H_{xy} 和 L_z 的本征矢，属于本征值 $(n+1)\hbar\omega$ 和 $m\hbar$，这里 n 与 m 由下式给出

$$
\begin{aligned}
n &= n_d + n_g \\
m &= n_d - n_g
\end{aligned}
\tag{197}
$$

算符 $a_d^\dagger$ 对矢量 $|\xi_{n_d,n_g}\rangle$ 的作用所给出的态多了一个量子，由于 m 的值已经增大了 1，我们便须给出这个态增添一个角动量 $+\hbar$(这对应于绕 Oz 轴沿逆时针方向的旋转)；同样的，算符 $a_g^\dagger$ 所给出的态也多了一个量子，角动量的改变为 $-\hbar$(这对应于顺时针旋转)。

由于 n_d 和 n_g 都是任意正整数 (或零)，于是我们又得到了前一段的结果：H_{xy} 的本征值的形式为 $(n+1)\hbar\omega$，其中 n 为正整数或零；这些本征值

的简并度为 $(n+1)$，这是因为，n 的值取定之后，可以有

$$\begin{aligned} n_d &= n & n_g &= 0 \\ n_d &= n-1 & n_g &= 1 \\ &\vdots & &\vdots \\ n_d &= 0 & n_g &= n \end{aligned} \tag{198}$$

另一方面，我们看到算符 L_z 的本征值的形式为 $m\hbar$，这里 m 为正的或负的整数或零。此外，从(198)可以推知 m 的哪些值与 n 的一个给定值相联系。例如，对于基态，$n_d = 0, n_g = 1$，这就决定了 $m = \pm 1$ 或 $m = -1$，在一般情况下，对于一个给定的能级 $(n+1)\hbar\omega$，m 的可能值为

$$m = n, n-2, n-4, \cdots, -n+2, -n \tag{199}$$

由此便可推知，对于 n 和 m 的一对值，对应着一个唯一的矢量

$$|\chi_{n_d = \frac{n+m}{2}, n_g = \frac{n-m}{2}}\rangle \tag{200}$$

因此，H 和 L_z 在空间 $\mathscr{E}_{xy}$ 中构成一个 CSCO。