10: 简谐振子

#Quantum_Mechanics

一个经典简谐振子的哈密顿量是:

$$H(x,p)=rac{p^2}{2m}+rac{m\omega^2x^2}{2}$$

考虑到 X, P 在量子力学中都是厄米算符,我们直接将上面的哈密顿量量子化为哈密顿 算符:

$$H(X,P)=rac{P^2}{2m}+rac{m\omega^2X^2}{2}$$

我们使用极强的注意力观察到以下两个算符:

$$A=\sqrt{rac{m\omega}{2\hbar}}\left(X+rac{iP}{m\omega}
ight) \quad A^{\dagger}=\sqrt{rac{m\omega}{2\hbar}}\left(X-rac{iP}{m\omega}
ight)$$

我们称 A 湮灭算符, A^{\dagger} 为创生算符。使用正则对易关系,我们就得到:

$$[A,A^{\dagger}]=igg(rac{1}{2\hbar}igg)(-i[X,P]+i[P,X])=1$$

另外我们定义能级算符:

$$N=A^{\dagger}A=rac{H}{\hbar\omega}-rac{1}{2}$$

因此我们得到了哈密顿算符和能级算符之间的重要关系:

$$H=\hbar\omega\left(N+rac{1}{2}
ight)$$

显然, H, N 可以被同时对角化。设 N 的本征矢量为 $|n\rangle$, 那么 H 的本征方程为:

$$|H|n
angle = igg(n+rac{1}{2}igg)\hbar\omega|n
angle$$

这意味着系统的本征态能量:

$$E_n=igg(n+rac{1}{2}igg)\hbar\omega$$

我们现在看看创生算符和湮灭算符的物理意义,注意到:

$$[N,A]=[A^\dagger A,A]=-a \quad [N,A^\dagger]=A^\dagger$$

因此我们可以计算:

$$NA^\dagger|n
angle=([N,A^\dagger]+A^\dagger N)|n
angle=(n+1)A^\dagger|n
angle\quad NA|n
angle=(n-1)A|n
angle$$

因此, $A^{\dagger}|n\rangle, A|n\rangle$ 都是 N 的本征矢量。另外, 注意到:

$$NA|n
angle=(n-1)A|n
angle\quad N|n-1
angle=(n-1)|n-1
angle$$

因此,我们发现,将 A 作用到 $|n\rangle$ 上面之后,我们其实得到了一个 $|n-1\rangle$ 这个本征矢量。当然这么说不准确,因为 $|n-1\rangle$ 和 $A|n\rangle$ 差一个常数倍。我们得到:

$$A|n
angle = c|n-1
angle$$

我们考虑一下归一化关系:

$$\langle n|A^\dagger A|n
angle = |c|^2$$

那么:

$$\langle n|A^\dagger A|n
angle = n\langle n|n
angle = n \Rightarrow n = |c|^2$$

一般来说,按照传统我们令 c 是正的,于是我们有 $c = \sqrt{n}$,于是我们就有:

$$A|n
angle = \sqrt{n}|n-1
angle \quad A^\dagger|n
angle = \sqrt{n+1}|n+1
angle$$

这两个算符可以连续作用,但是显然湮灭算符只能作用有限次(也就是使得 n 降到 0),这是对 $a|n\rangle$ 的模长保持为正的要求:

$$\langle n|N|n
angle = (\langle n|A^\dagger)\cdot (A|n
angle) \geq 0$$

那么我们就得到了谐振子的基态能量:

$$E_0=rac{1}{2}\hbar\omega$$

对着基态的本征矢量连续使用创生算符:

$$|n
angle = \left[rac{(A^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}
ight]\!|0
angle$$

根据 $|n\rangle$ 的正交性,很容易知道 A 的矩阵表示:

$$\langle n'|A|n
angle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1} \quad \langle n'|A^\dagger|n
angle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1}$$

这样我们也可以给出 X, P 算符的矩阵表示, 只要注意到:

$$X=\sqrt{rac{\hbar}{2m\omega}}(A+A^{\dagger}) \quad P=i\sqrt{rac{m\hbar\omega}{2}}(-A+A^{\dagger})$$

(具体的矩阵元此处略)可以注意到 X, P 都不是对角化的,这一点都不稀奇,因为 X, P 和 N 本来就不是对易的。

我们还可以通过创生、湮灭算符这一套表示给出能量本征态在位置表象下的表示。我们之前说过 |0> 是基态,不能再下降了。因此它的定义方法是:

$$A|0
angle=0$$

将其投影到位置算符的本征矢量上:

$$\langle x'|A|0
angle = \sqrt{rac{m\omega}{2\hbar}}\langle x'|\left(X+rac{iP}{m\omega}
ight)|0
angle = 0$$

根据第一章中我们得到的推论:

$$\langle x'|P|lpha
angle = -i\hbar\langle x'|lpha
angle$$

我们将得到一个关于 $\langle x'|0\rangle$ 的微分方程:

$$\left(x'+x_0^2rac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}
ight)\!\langle x'|0
angle=0,\;x_0=\sqrt{rac{\hbar}{m\omega}}$$

解这个方程,得到:

$$\langle x'|0
angle = \left(rac{1}{\pi^{rac{1}{4}}\sqrt{x_0}}
ight) \exp\left(-rac{1}{2}{\left(rac{x'}{x_0}
ight)}^2
ight)$$

通过反复将创生算符应用到 |0> 上, 我们就得到了:

$$\langle x'|n
angle = \left(rac{1}{\pi^{rac{1}{4}}\sqrt{2^n n!}}
ight) \left(rac{1}{x_0^{n+rac{1}{2}}}
ight) \left(x'-x_0^2rac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}
ight)^n \exp\left(-rac{1}{2}{\left(rac{x'}{x_0}
ight)}^2
ight)$$

我们可以看看基态时的 $\langle X^2 \rangle$, $\langle P^2 \rangle$, 写出:

$$X^2 = igg(rac{\hbar}{2m\omega}igg)(A^2 + (A^\dagger)^2 + A^\dagger A + A A^\dagger)$$

计算期望的时候,只有最后一项有贡献。类似可以计算 $\langle P^2 \rangle$,得到:

$$\langle X^2
angle = rac{x_0^2}{2} \quad \langle P^2
angle = rac{hm\omega}{2}$$

也就是说,我们可以给出"势能"和"动能"的均值:

$$\langle rac{P^2}{2m}
angle = rac{\hbar \omega}{4} \quad \langle rac{m \omega^2 X^2}{2}
angle = rac{\hbar \omega}{4}$$

另外,很容易看出:

$$\langle X \rangle = \langle P \rangle = 0$$

这样我们可以得到基态的不确定关系(刚好取等!):

$$\langle (\Delta X)^2
angle \langle (\Delta P)^2
angle = rac{\hbar^2}{4}$$

实际上对于激发态也可以计算:

$$\langle (\Delta X)^2
angle \langle (\Delta P)^2
angle = \left(n + rac{1}{2}
ight)^2 \hbar^2$$

上面都是薛定谔绘景,下面我们可以看看海森堡绘景,因为这个绘景可以清晰地给出 算符随着时间的演化。先写薛定谔方程:

$$rac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}t} = -m\omega^2 X \quad rac{\mathrm{d}X}{\mathrm{d}t} = rac{P}{m}$$

这两个方程是耦合的,但是我们可以惊奇地发现:关于创生算符和湮灭算符的方程不是耦合的:

$$rac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = -i\omega A \quad rac{\mathrm{d}A^\dagger}{\mathrm{d}t} = i\omega A^\dagger$$

从而得到解:

$$A(t) = A(0) \exp(-i\omega t) \quad A^{\dagger}(t) = A^{\dagger}(0) \exp(i\omega t)$$

从这里可以看出 H,N 都是不含时的(注意:如果 H 含时并且 $[H(t_1),H(t_2)]\neq 0$,那么这个问题就得使用路径积分处理了),现在我们可以直接解出:

$$X(t) = X(0)\cos\omega t + \left[rac{P(0)}{m\omega}
ight]\sin\omega t \quad P(t) = -m\omega X(0)\sin\omega t + P(0)\cos\omega t$$

就像是经典力学中的简谐振动一样!

我们同时提供另一种方法,不需要对海森堡方程进行解耦并显式求解也能得到上面的 X(t),利用时间演化算符:

$$X(t) = \exp\left(rac{iHt}{\hbar}
ight) X(0) \exp\left(-rac{iHt}{\hbar}
ight)$$

我们引入一个纯数学的公式,即所谓 Baker-Husdorff 引理:

$$\exp(iG\lambda)A\exp(-iG\lambda) = A + I\lambda[G,A] + \left(rac{i^2\lambda^2}{2!}
ight)[G,[G,A]] + \cdots + \left(rac{i^n\lambda^n}{n!}
ight)[G,[G,\cdots,[G,a]]$$

将这个式子用在 X(t) 的表达式上,我们有:

$$X(t)=X(0)+\left(rac{it}{\hbar}
ight)[H,X(0)]+\left(rac{i^2t^2}{2!\hbar^2}
ight)[H,[H,X(0)]]+\cdots$$

通过反复利用:

$$[H,X(0)]=-rac{i\hbar P(0)}{m}\quad [H,P(0)]=i\hbar m\omega^2 X(0)$$

我们可以将 X(t) 展开成关于 X(0), P(0) 的级数的形式,这样我们也能求出 X(t) 的表达式。

显然,如果考虑一个能量本征态 $|n\rangle$,那么 $\langle X\rangle$, $\langle P\rangle$ 始终是 0 (这是由于 X,P 可以写成 A^{\dagger},A 的线性组合),这也符合我们之前的讨论:能量本征态是所谓"稳态",各个观测量的期望都不随着时间变化!要想看到观测值期望随着时间的演化,初态必须处在叠加态上。此外,我们其实可以通过叠加一些能量的本征态 $|\lambda\rangle = \sum_n f(n)|n\rangle$ 来得到一个很像经典谐振子的系统——它的波包不会随着时间散开,而会不断震荡。