10：简谐振子

#Quantum_Mechanics

一个经典简谐振子的哈密顿量是：

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

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：

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

我们使用极强的注意力观察到以下两个算符：

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

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：

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

另外我们定义能级算符：

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

因此我们得到了哈密顿算符和能级算符之间的重要关系：

$$H=\hbar\omega\left(N+\frac{1}{2}\right)$$

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：

$$H|n\rangle=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle$$

这意味着系统的本征态能量：

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

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：

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

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

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

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：

$$A|n\rangle = c|n-1\rangle$$

我们考虑一下归一化关系：

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

那么：

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

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：

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

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：

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

那么我们就得到了谐振子的基态能量：

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

对着基态的本征矢量连续使用创生算符：

$$|n\rangle = \left[\frac{(A^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\right]|0\rangle$$

根据 $|n\rangle$ 的正交性，很容易知道 A 的矩阵表示：

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

这样我们也可以给出 X, P 算符的矩阵表示，只要注意到：

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

（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 $|0\rangle$ 是基态，不能再下降了。因此它的定义方法是：

$$A|0\rangle = 0$$

将其投影到位置算符的本征矢量上：

$$\langle x'|A|0\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\langle x'|\left(X + \frac{iP}{m\omega}\right)|0\rangle = 0$$

根据第一章中我们得到的推论：

$$\langle x'|P|\alpha\rangle = -i\hbar\langle x'|\alpha\rangle$$

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

$$\left(x' + x_0^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}\right)\langle x'|0\rangle = 0,\ x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

解这个方程，得到：

$$\langle x'|0\rangle = \left(\frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{x_0}}\right)\exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right)$$

通过反复将创生算符应用到 $|0\rangle$ 上，我们就得到了：

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

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

$$X^2 = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)(A^2 + (A^\dagger)^2 + A^\dagger A + AA^\dagger)$$

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：

$$\langle X^2 \rangle = \frac{x_0^2}{2} \quad \langle P^2 \rangle = \frac{hm\omega}{2}$$

也就是说，我们可以给出“势能”和“动能”的均值：

$$\langle \frac{P^2}{2m} \rangle = \frac{\hbar\omega}{4} \quad \langle \frac{m\omega^2 X^2}{2} \rangle = \frac{\hbar\omega}{4}$$

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！）：

$$\langle (\Delta X)^2 \rangle \langle (\Delta P)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

实际上对于激发态也可以计算：

$$\langle (\Delta X)^2 \rangle \langle (\Delta P)^2 \rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar^2$$

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：

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

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：

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

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：

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

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：

$$X(t) = \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right)X(0)\exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right)$$

我们引入一个纯数学的公式，即所谓 Baker-Husdorff 引理：

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

将这个式子用在 $X(t)$ 的表达式上，我们有：

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

通过反复利用：

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

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。