链滴

简谐振子 笔记

作者：Roseleaves
原文链接：https://ld246.com/article/1633624787737
来源网站：链滴
许可协议：署名-相同方式共享 4.0 国际 (CC BY-SA 4.0)

<h2 id="简谐振子-笔记">简谐振子 笔记</h2>
参考：格里菲斯 z-lib archive.org
<h2 id="1--势能--从能量算子到升降子">1. 势能, 从能量算子到升降子</h2>
经典模型中的力满足 F\propto - x, 解出简谐振动方 x=A\sin(\omega t+\varphi), 从而正比关系的比例系数 m\omega^2.
量子力学沿用势场的表达式, 即
\hat U = \frac12 m\omega^2x^2 = \frac{1}{2m}(m\omega x)^2

\begin{aligned}

\hat H&=\hat T+\hat U

= -\frac{ \hbar ^2}{2m} {\frac{\mathrm d^2}{\mathrm dx^2}}

+\frac12 m\omega^2x^2

\&=\frac{1}{2m}[

\hat p^2+(m\omega\hat x)^2].

\end{aligned}

遇到平方和关系。注意到 \hat p 的表达式中自带虚单位，考虑将虚数单位提出来，回归平方差。对不可交换的乘法，平方差公式只能表示为
A^2 - B^2=\frac12[(A+B)(A - B)+(A - B)(A+B)],
因此设无量纲的降子和升子
a=\frac{m\omega\hat x+\mathrm i \hat p}

{\sqrt{2 \hbar m\omega}},

a^*=\frac{m\omega\hat x - \mathrm i \hat p}

{\sqrt{2 \hbar m\omega}},

继续展开，得
\hat H=\frac12 \hbar \omega(aa^*+a^*a).
<h2 id="2--升降子的本性">2. 升降子的本性</h2>
<h3 id="2-1--共享特征向量">2.1. 共享特征向量</h3>
根据动量和位置的交换子 [{\hat p},{\hat x}]= - i \hbar </spa> 知
\begin{aligned}

[{a},{a^}]&=aa^ - a^*a

\&=\frac1{2 \hbar m\omega}

(\mathrm i \hat p\circ2m\omega\hat x-

2m\omega\hat x\circ \mathrm i \hat p)

\&=\frac{\mathrm i} \hbar (\hat p\hat x - \hat x\hat p)

=\frac{[{\hat p},{\hat x}]}{ - i \hbar }=I.

\end{aligned}

因此，a^*a 和 a^* 只相差一个常数子，又 \hat H 本质上是量化的它们的平均，所以 a^*a, aa^*,\hat H 共享相同的征向量。也就是说， aa^*=a^*a+I，而且 \hat H 可以表示为
\hat H= \hbar \omega(aa^* - \frac12I)= \hbar \omega(a^*a+\frac12I).
<h3 id="2-2--存在基态">2.2. 存在基态</h3>
解零化方程 a\psi=0 ，得到范数为一的解 \psi_0 ，具体细节后续详述。
事实上降子的核空间 \ker a 正是一维的，由 \psi_0 张成。
显然， a^*a (\psi_0)=0。因此
\hat H\psi_0=\frac12 \hbar \omega\psi_0,
即 \psi_0 是（能量算子 \hat H 的，下同）属于特征值 \dfrac12 \hbar \omega 的特征向量。它被称为基态。
<h3 id="2-3--升子增加特征值-降子减少特征值">2.3. 升子增加特征值，降子减少特征值</h3>
设 \psi 是属于特征值 \left(\lambda+\dfrac12\right) \hbar \omega 的特征向量，那么：
\begin{aligned}

a^*a(\psi)&&=(\lambda)(\psi)

\aa^*(\psi)&=(a^*a+I)\psi&
(\lambda+1)(\psi)

\a^ a(a^\psi)&=a^ (aa^)\psi \&=a^*(\lambda+1)\psi
amp;=(\lambda+1)(a^*\psi)

\a^ a(a\psi)&=(aa^ - I)a\psi \&=a(a^*a)\psi -
a\psi&=(\lambda - 1)(a\psi)

\

\end{aligned}

经过了升子或降子的作用，特征向量仍然是特征向量，但属于不同的特征值，因此它们都是正交（后面还会说），这很不平凡。事实上，升子将特征能量上升 \hbar \omega，降子将特征能量下降 \hbar \omega。
<h3 id="2-4--对自然数公理的模仿">2.4. 对自然数公理的模仿</h3>
如果模仿自然数公理，认为自然数 0,1,2,3\dots 和征向量 \psi_0,\psi_1,\dots 一一对应，那么：

存在一个基态 \psi_0 ，它是特征向量。

基态对应自然数 0 。

如果 \psi 是特征向量，那么它的升阶 <span class="
anguage-math">a^*\psi 也是特征向量。

因为这些特征向量都是正交的，所以相等的定义直接用共线代替即可。
共线确实满足自反性、传递性、对称性。
升子对应后继，降子对应前趋。

没有特征向量升阶能得到基态。

基态不是任何特征向量的升阶，它属于降子的核空间。

正交的特征向量组逐一升阶，必然得到正交的特征向量组。

如果两个特征向量的升阶共线，那么它们一定共线。

设 P(\psi) 是关于特征向量的一个性质。如果 <span
lass="language-math">P(\psi_0) 是真的，而且只要 P(
psi) 是真的， P(a^*\psi) 就也是真的，那么对
每个特征向量 \psi， P(
psi) 都是真的。

注意，数系扩充后自然数性质从来不要求对非自然数不成立，同样，属于此系整数特征值的特征
量的性质也不能说对属于非此系特征向量就不成立。甚至，大可存在此系之外
特征向量。只不过那个向量也要对应于另一个降子核空间的元素。

<h2 id="3--升降子与内积">3. 升降子与内积</h2>
<h3 id="3-1--升子与降子相伴随">3.1. 升子与降子相伴随</h3>
利用位置算子作为乘法的线性，和动量算子作为微分算符的分部反线性。
\begin{aligned}

&\left<{f}|{ag}\right
gt; - \left<{a^*f}|{g}\right>

\&=\int_\mathbb R f^*\left(\frac{m\omega\hat x+\mathrm i \hat p}

{\sqrt{2 \hbar m\omega}}g\right)\mathrm d{x}

-\int_\mathbb R \left(\frac{m\omega\hat x - \mathrm i \hat p}

{\sqrt{2 \hbar m\omega}}f^*\right)g\mathrm d{x}

\&=\frac1{\sqrt{2 \hbar m\omega}}\left{

\int_\mathbb R \left[f^(m\omega\hat x g) - (m\omega\hat x f^)g\right]\mathrm d{x}+

\int_\mathbb R \left[f^(\mathrm i \hat pg)+(\mathrm i \hat pf^)g\right]\mathrm d{x}\right}

\&=\frac1{\sqrt{2 \hbar m\omega}}\left[

\int_\mathbb R (m\omega xf^*g - m\omega xf^*g)\mathrm d{x}+ \hbar

\int_\mathbb R \left(f^\frac{\mathrm d g}{\mathrm d x}+ \frac{\mathrm d f^}{\mathrm d x} g\rig
t)\mathrm d{x}\right]

\&=\frac1{\sqrt{2 \hbar m\omega}}\left[

\int_\mathbb R 0\mathrm d{x} + \int_0^0 \mathrm d{(f^*g)}\right]=0

\end{aligned}

<h3 id="3-2--特征向量的增殖和范数">3.2. 特征向量的增殖和范数</h3>
设 \psi 是算子 a^
a 的属于 \lambda 的特征向量, 则计算它被算子
a 和 a^* 作
所得向量的范数得到
\begin{aligned}

\left<{a\psi|a\psi}\right>

&=\left<{\psi|a^*a\psi}\right>

\&=\left<{\psi|\lambda\psi}\right>

\&=\lambda\left<{\psi|\psi}\right
gt;=\lambda,

\end{aligned}

\begin{aligned}

\left<{a^ \psi|a^\psi}\right>

&=\left<{\psi|aa^*\psi}\right>

=\left<{\psi|(a^*a+I)\psi}\right>

\&=\left<{\psi|a^*a\psi+\psi}\right>

=\left<{\psi|\lambda\psi+\psi}\right>

\&=(\lambda+1)\left<{\psi|\psi}\right
gt;=\lambda+1.

\end{aligned}

\psi_{n} 的编号使 <span class="language-math"
a^*a\psi_{n}=n\psi_{n} . 为了归一化, 一般定义
\psi_{n}:=\frac{1}{\sqrt{n}} a^*\psi_{n-1},

迭代可知 \psi_n=\dfrac1{\sqrt{n!}}a^{*n}\psi_0 . 且相应地成立递推式
\begin{aligned}

a^*\psi_{n}&=\sqrt{n+1}\psi_{n+1},\
a\psi_{n}&=\sqrt{n}\psi_{n-1}.

\end{aligned}

我们曾经提到过, 设 n\ne m , 则 \psi_n 与 \psi_m 正交. 事实上,
\begin{aligned}

n\left<\psi_n|\psi_m\right>&
\left<a^*a\psi_n|\psi_m\right>

\&=\left<\psi_n|a^*a\psi_m\right>

=m\left<\psi_n|\psi_m\right>,

\end{aligned}

因而只有可能 \left<\psi_n|\psi_m\right>=0 . 这正交性质意味着, 我们将振子的实际波函数按定态展开时, 我们可以用傅立叶技巧确定展开系数 c_n , 它的模长平方也是测量能量得到 \left(n+\dfrac12\right)\hbar\omega 的概率.
<h3 id="3-3--坐标和动量的矩">3.3. 坐标和动量的矩</h3>
\left<p^n\right>=\left<\psi|\hat p^n|\psi \right>=\int_\mathbb R\psi^*\hat p^n\psi\mathrm dx 称为向量 \psi 关于算子 \hat p 的第 n 阶矩.
用升降算子反向表示坐标和动量, 有
\hat x=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{a+a^*}{\sqrt 2},\\\ \\

\hat p=-\mathrm i\hbar\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{a-a^*}{\sqrt 2}.

从而利用升降子的递推式, 将坐标和动量的矩算出, 这里设 \psi 是 a^*a 的属于 \lambda 的特征向量, 并求二阶矩:
\begin{aligned}

\left<\hat x^2\right>&
\frac{\hbar}{2m\omega}\left<\psi|(aa+aa^*+a^*a+a^
^)\psi\right>

\&=\frac{\hbar}{2m\omega}\left(\left<
psi|a^2\psi\right>+\left<
psi|aa^*\psi\right>+\left<
psi|a^*a\psi\right>+\left<
psi|a^{*2}\psi\right>\right)

\&=\frac{\hbar}{2m\omega}\left(0+\left<
psi|(\lambda+1)\psi\right>

+\left<\psi|\lambda\psi\right>+0\right)

\&=\frac{\hbar}{m\omega}\left(\lambda+\frac12\right)

\end{aligned}

\begin{aligned}

\left<\hat p^2\right>&
-\frac{m\hbar\omega}{2}\left<\psi|(aa-aa^*-a^*a+a^
^)\psi\right>

\&=-\frac{m\hbar\omega}{2}\left(\left<
psi|a^2\psi\right>-\left<
psi|aa^*\psi\right>

-\left<\psi|a^*a\psi\right>+\left
lt;\psi|a^{*2}\psi\right>\right)

\&=-\frac{m\hbar\omega}{2}\left(0-\left<
psi|(\lambda+1)\psi\right>

-\left<\psi|\lambda\psi\right>+0\right)

\&={m\hbar\omega}\left(\lambda+\frac12\right)

\end{aligned}

因而得到平均势能和平均动能. 它们恰好都是总能的一半.
\begin{aligned}

\left<V\right>=\left<
frac12m\omega^2x^2\right>&
\frac12m\omega^2\left<x^2\right>

=\frac12 \hbar\omega\left(\lambda+\frac12\right)\

\left<T\right>=\left<
frac1{2m}p^2\right>&=\frac1{2m}\left
lt;p^2\right>

=\frac12 \hbar\omega\left(\lambda+\frac12\right)

\end{aligned}

<h3 id="3-4--坐标和动量的均值和方差">3.4. 坐标和动量的均值和方差</h3>
一个算子 A 的不确定度可以用它的标准差来量度, 准差就是方均根, 而它的方差, 我们可以把“与均值的偏离程度”的均值从平方式中提出来, 有 <span c
ass="language-math">D(A)=\left<\left(A-E(A)\right)^2\right>=\left<A^2\right>-\l
ft<A\right>^2.
\begin{aligned}

E(x)&=\left<x\right>\
amp;=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left<\psi|
a+a^*)\psi\right>

\&=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\left<
psi|a\psi\right>+\left<\psi|a^*\
si\right>\right)

\&=0

\

D(x)&=\left<x^2\right>
\left<x\right>^2

\&=\frac{\hbar}{m\omega}\left(\lambda+\frac12\right)-0^2

\&=\frac{\hbar}{m\omega}\left(\lambda+\frac12\right)

\

E(p)&=\left<p\right>

\&=-\mathrm i\hbar\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left<
psi|(a-a^*)\psi\right>

\&=-\mathrm i\hbar\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\left<
psi|a\psi\right>-\left<\psi|a^*\ps
\right>\right)

\&=0

\

D(p)&=\left<p^2\right>
\left<p\right>^2

\&={m\hbar\omega}\left(\lambda+\frac12\right)-0^2

\&={m\hbar\omega}\left(\lambda+\frac12\right)

\end{aligned}

这自然是坐标算子、动量算子的二阶矩，除了计算动能、势能之外的另一个应用。从而, 坐标与量的不确定度满足 Heisenburg 不确定性原理, 有
\begin{aligned}

\Delta x\Delta p&=\sqrt{D(x)}\sqrt{D(p)}

\&=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}\left(\lambda+\frac12\right)}

\sqrt{{m\hbar\omega}\left(\lambda+\frac12\right)}

\&=\hbar\left(\lambda+\frac12\right)

\&\ge\frac\hbar2

\end{aligned}

<h2 id="4--振动波函数的分析求解">4. 振动波函数的分析求解</h2>
<h3 id="4-1--基态与负平方指数">4.1. 基态与负平方指数</h3>
对角频率为 \omega 的振子, 设空间坐标的自然标为
D=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},
按该标度去量纲化的坐标为 q=\dfrac xD, 则降子和子的表达式为
a\phantom {^*}=\frac{m\omega \hat x+\mathrm i\hat p}{\sqrt{\hbar m\omega}}=\frac1{\sqrt 2}\left(q+\frac{\mathrm d}{\mathrm d q}\right),\\\ \\a^*=\frac m\omega \hat x-\mathrm i\hat p}{\sqrt{2\hbar m\omega}}=\frac1{\sqrt 2}\left(q-\frac{\mathrm d}{\mathrm d q}\right).
从而降子核空间中的基态, 根据零化方程
\frac1{\sqrt 2}\left(q\psi_0+\frac{\mathrm d\psi_0}{\mathrm d q\right)=0,
解得
\psi_0=A\mathrm e^{-\frac12q^2},
归一化系数服从 |A|^2D\sqrt\pi =1 , 它有著名的开次方的形式
A=\mathrm e^{\mathrm i\theta}\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbr}}.
降子的核空间是一维的, 基态只有这么一族. 所以任何振子的实际波函数都可以用这个基态和它的阶来线性表出.
<h3 id="4-2--激发态与多项式系数">4.2. 激发态与多项式系数</h3>
我们注意到指数函数对导数运算有某种不变性. 它和线性运算一起, 使得激发态波函数为一个关于标 q 的多项式 H_n(q)/span> 和指数 \mathrm e^{-\frac12q^2} 的乘积. 考到迭代关系 \psi_n=\dfrac1{\sqrt{n!}}(a^*)^{n}\psi_0, 及升降子中的系数 \dfrac1{\sqrt2}, 将通式
\begin{aligned}

\psi_n=\frac1{\sqrt{n!,2^n}}H_n(q),
mathrm e^{-\frac12q^2}

\end{aligned}

代入递推式 a\psi_n=\sqrt n\psi_{n-1}, 得:
\begin{aligned}

\frac1{\sqrt2}\left(q+\frac{\mathrm d}{\mathrm dq}\right)

\left(\frac{H_n(q)\,\mathrm e^{-\frac12q^2}}{\sqrt{n!\,2^n}}\right)

&= \sqrt n \left(\frac{H_{n-1}(q)\,\mathrm e^{-\frac12q^2}}{\sqrt{(n-1)!\,2^{n-1}}}\right)

\\

qH_n(q)\mathrm e^{-\frac12q^2} + H_n'(q)\mathrm e^{-\frac12q^2}

+ H_n(q)\mathrm e^{-\frac12q^2}(-q) &= 2n H_{n-1}(q)\mathrm e^{-\frac12q^2}

\\

H_n'(q) & =2nH_{n-1}(q);

\end{aligned}

代入递推式 a^*\psi_n=\sqrt {n+1}\psi_{n+1}, 得
\begin{aligned}

\frac1{\sqrt2}\left(q-\frac{\mathrm d}{\mathrm dq}\right)

\left(\frac{H_n(q)\,\mathrm e^{-\frac12q^2}}{\sqrt{n!\,2^n}}\right)

&= \sqrt {n+1} \left(\frac{H_{n+1}(q)\,\mathrm e^{-\frac12q^2}}{\sqrt{(n+1)!\,2^{n+1}}}\right)

\\

qH_n(q)\mathrm e^{-\frac12q^2} - H_n'(q)\mathrm e^{-\frac12q^2}

- H_n(q)\mathrm e^{-\frac12q^2}(-q) &= H_{n+1}(q)\mathrm e^{-\frac12q^2}

\\

2qH_n(q) - H_n'(q) &= H_{n+1}(q);

\end{aligned}

联立得到不含微分的递推公式为：
H_{n+1}(q)=2qH_n(q) - 2nH_{n-1}(q).
这就是物理学中的 Hermite 多项式.
<h2 id="5--Hermite-多项式的性质">5. Hermite 多项式的性质</h2>
<h3 id="5-1--边界条件">5.1. 边界条件</h3>
H_0(x)=1,\ H_1(x)=2x.
<h3 id="5-2--递推公式">5.2. 递推公式</h3>
只引用上一元形式（它也导致前后两个多项式的零点都是相互穿插的）：
H_n'(x)=2nH_{n-1}(x).

不含导数形式：
H_{n+1}(x)=2qH_n(x) - 2nH_{n-1}(x).
Hermite 方程：
y''-2xy'+2ny=0.
系数递推公式，其中 H_n(x)=\sum\limits_{i=0}^\infty a_{n,i x^i：
(i+2)(i+1)a_{n,i+2}-2ia_{n,i}+2na_{n,i}=0.
也就是说，奇数次幂系数和偶数次幂系数是两套独立的递推体系。
<h3 id="5-3--通项公式">5.3. 通项公式</h3>
我们设 Hermite 多项式的奇数项只含奇数次幂，偶数项只含偶数次幂，且最高次幂系数为 a_{n,n}=2^n, 那么
\begin{aligned}

a_{2n,2m}&=a_{2n,2n}\frac{(2n)!}{(2m)!}\prod\limits_{i=m}^{n-1}\frac{1}{4(n-i)}

\&=2^{2m}\frac{(2n)!}{(2m)!}\prod\limits_{i=m}^{n-1}\frac{1}{(n-i)},\

a_{2n-1,2m-1}&=a_{2n-1,2n-1}\frac{(2n-1)!}{(2m-1)!}\prod\limits_{i=m}^{n-}\frac1{4(n-i)}

\&=2^{2m-1}\frac{(2n-1)!}{(2m-1)!}\prod\limits_{i=m}^{n-1}\frac{1}{(n-i)}.

\end{aligned}

H_n(x)=\frac{(\frac{\mathrm d}{\mathrm dx})^n\mathrm e^{-x 2}}{(-1)^n\mathrm e^{-x^2}}.
而 Hermite 多项式的母函数为
\Psi(t,x)=\mathrm e^{-t^2+2tx}=\sum_{n=0}^\infty\frac{t^n}{n! H_n(x).