2009 年 7 月 重庆师范大学学报(自然科学版) Jul. 2009
第 26 卷 第 3 期 Journal of Chongqing Normal University(Natural Science) Vol. 26 No. 3

DOI:10.3969/J.ISSN.1672-6693.2009.03.029

简谐振子波函数的代数解及 Hermite 多项式的递推*

王帮美，胡先权
(重庆师范大学 物理学与信息技术学院，重庆 400047)

摘要：简谐振子模型是量子力学中极其简单又重要的模型，其物理思想在其他相关的学科中都有着广泛的应用，通过多种途径去深入理解简谐振子模型，对理解量子力学的实质和运用量子力学作为工具去研究微观物理模型都有重要的意义；另一方面在实际工作中应用代数方法去求解力学量的本征值和波函数是研究量子力学的主要手段。以简谐振子为例，运用代数方法，先给出一维简谐振子的波函数，从而推广到多维简谐振子，并结合相应算符的对易关系给出 Hermite 多项式及其递推关系，回避了通过级数展开去求解 Hermite 方程的过程；同时指出《厄米本征值问题的探究》一文中的不足之处。

关键词：升降算符；简谐振子；波函数；Hermite 多项式
中图分类号：O411.1 文献标识码：A 文章编号：1672-6693(2009)03-0119-04

在量子力学中，单个物理对象的绝大多数信息都包含在本征值和波函数里面，但是对波动方程的解大多是在一定边界条件下去求解微分方程，求解过程中势必要面临很多复杂烦琐的特殊函数[1-2]；所以在实际工作中更多的是应用代数方法去求力学量的本征值和波函数[3]，因为代数求解过程的递推关系给了算法语言应用很大的支撑，特别在计算机技术成为量子力学的研究手段后，代数方法显得尤为重要。

本文试以简谐振子为例，运用代数方法，先给出一维简谐振子的波函数，从而推广到多维的简谐振子，并结合相应的对易给出 Hermite 多项式及其递推关系，回避了通过级数展开去求解 Hermite 方程的过程；同时指出《厄米本征值问题的探究》一文中的不足之处。

1 升降算符与一维谐振子的能级

一维谐振子在坐标表象的 Hamilton 算符为 $\hat{H}=\dfrac{\hat{p}^2}{2m}+\dfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$，设

$$\hat{a}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}+\frac{\mathrm{i}}{m\omega}\hat{p}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\tag{1}$$

$$\hat{a}^{+}=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x}-\frac{\mathrm{i}}{m\omega}\hat{p}\right)=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\tag{2}$$

其中 $\xi=\sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}x$，这里的 $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^{+}$ 分别称为下降算符(lowering operator)和上升算符(raising operator)[3-5]。虽然 $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^{+}$ 都有各自的本征值和本征函数，但这两者都不是 Hermite 的，都不能代表物理学量。再由 $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^{+}$ 的表达式，有

$$[\hat{a},\hat{a}^{+}]=\hat{a}\hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\hat{a}=1$$

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2=\hbar\omega\left(\hat{a}\hat{a}^{+}+\frac{1}{2}\right)\tag{3}$$

取 $\hat{a}\hat{a}^{+}$ 的 Hermite 共轭，$(\hat{a}\hat{a}^{+})^{+}=\hat{a}\hat{a}^{+}$，$\hat{a}\hat{a}^{+}$ 是 Hermite 的。可设 $\hat{a}\hat{a}^{+}|v\rangle=v|v\rangle\,(v\in\mathbf{R})$，其中 $|v\rangle$ 为 $a\hat{a}^{+}$ 在 Hilbert 空间中粒子数表象中的本征状态矢量，利用(1)式的对易关系，得到

---

* 收稿日期：2008-12-25 修回日期：2009-03-25
资助项目：重庆市教委基础理论研究基金(No. KJ060812)
作者简介：王帮美，男，硕士研究生，研究方向为原子分子理论研究；通讯作者：胡先权，Email：huxquan2003@yahoo.com.cn

$$\hat{a}\,|v\rangle = \sqrt{v}\,|v-1\rangle \tag{4}$$

其中$\sqrt{v}$是归一化要求得到的(实际上$\sqrt{v}$中还存在一个不影响结果的不确定相因子 $e^{i\delta}$[5]),$\hat{a}$ 在 $|v\rangle$ 上作用 v 次后有$(\hat{a})^v|v\rangle = \sqrt{v!}\,|0\rangle$(这里的 $|0\rangle$ 是一维谐振子的基态),这一过程说明 v 一定是非负整数。再由(3) 式就能得到一维谐振子的 Hamilton 算符$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}\hat{a}^+ + \frac{1}{2})$ 的本征值

$$E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\text{(其中 } n = 0,1,2,3,\cdots\text{)} \tag{5}$$

2 用升降算符导出谐振子波函数的具体表达式

类似(4) 式,还有 $\hat{a}^+\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$,若 $\hat{a}^+$ 从一维谐振子的基态 $|0\rangle$ 开始作用 n 次后,就能得到量子数为 n 的波函数了,即$(a^+)^n|0\rangle = \sqrt{n!}\,|n\rangle$。将 $|n\rangle$ 映射到位形空间,根据(1)、(2) 式的定义,可得一维谐振子在坐标表象的波函数的微分形式

$$\Psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n\langle x|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!2^n}}\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n\Psi_0(x)$$

至于 $\Psi_n(x)$ 的具体表达式,由(5) 式有 $a|0\rangle$,于是$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}+\xi\right)\Psi_0(\xi) = 0$,得

$$\Psi_0(x) = C_0 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = C_0 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$

其中 $C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$ 是波函数归一化得到的,所以

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!2^n}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$

然后再反复利用下列递推关系得到

$$\begin{cases}
\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \xi e^{-\frac{1}{2}\xi^2} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = e^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)e^{-\xi^2} = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_1(\xi) \\
\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)e^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)e^{-\xi^2} = e^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^2 e^{-\xi^2} = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_2(\xi) \\
\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^3 e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)e^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^2 e^{-\xi^2} = e^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^3 e^{-\xi^2} = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_3(\xi) \\
\cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots\ \cdots \\
\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)e^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{n-1} e^{-\xi^2} = e^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n e^{-\xi^2} = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_n(\xi)
\end{cases} \tag{6}$$

其中 $H_n(\xi) = e^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = e^{\xi^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n e^{-\xi^2}$ 是 Hermite 多项式的微分表示,最后就有了一维谐振子的波函数(Weber-Hermite 函数[6])

$$\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!2^n}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \frac{1}{\sqrt{n!2^n}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_n(\xi) \tag{7}$$

其中 $C_n = \frac{1}{\sqrt{n!2^n}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$ 是波函数的归一化系数。

对于 i 维的谐振子,根据 Schröinger 方程的线性特性(实为态迭加原理),即$\hat{H} = \sum_i \hat{H}_i$,由(3)、(5)、(7) 这 3 个式子就有 $E_{n_1\cdots n_i\cdots} = \sum_i E_{n_i} = \sum_i \hbar\omega\left(n_i+\frac{1}{2}\right)$,$\Psi_{n_1\cdots n_i\cdots}(x) = \prod_{i=1}\Psi_{n_i}(x_i) = \prod_{i=1}\frac{1}{\sqrt{n!2^{n_i}}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_{n_i}(\xi_i)$。

另外,上面的(6) 式更有一般性的结论[5] 为$\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n f(\xi) = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} f(\xi)$,利用数学归纳法即可得到该式,此处从略。

3 Hermite 多项式的递推关系

对于算符$\hat{A}$、$\hat{B}$,有$[\hat{A},\hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]$[3],那么

$$\begin{cases} \left[\xi,\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n\right] = n\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{n-1}\left[\xi,\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right] = n\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{n-1} \\ \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi},\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n\right] = n\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{n-1}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi},\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right] = n\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{n-1} \end{cases}$$

1) $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}H_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi)$

同时对 Hermite 多项式 $H_n(\xi) = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ 两边求导,有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}H_n(\xi) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right] = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\xi\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} + \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} =$$

$$\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\left[\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n \xi + n\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{n-1}\right]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} + \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\left[\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} + n\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{n-1}\right]\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} =$$

$$2n\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{n-1}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} = 2nH_{n-1}(\xi)$$

2) $H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi)$

$$H_{n+1}(\xi) = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^{n+1}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\xi\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} - \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} =$$

$$2\xi\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\xi^2}\right] = 2\xi H_n(\xi) - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}H_n(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi)$$

有关 Hermite 多项式的其他递推关系的推导和上面的过程类似[7],这里就不再赘述了。

另外,笔者发现《厄米本征值问题的探究》[8](以下简称《厄》文)一文中有关 Hermite 多项式的递推(7)、(8)式具有原则性错误。这是因为如果单纯地从 Hermite 本征值问题(《厄》文中的(1)式)出发,只能得到奇次 Hermite 多项式或偶次 Hermite 多项式系数间的递推关系,而不会有连续自然数的 Hermite 多项式系数间的递推关系,而《厄》文却牵强地认为 $H_0 = a_0$ 和 $H_1 = a_1\xi$ 的系数相等,即 $a_0 = a_1$,从而得到了 $H_1 - \xi H_0 = 0$ 的错误结论(《厄》文中的(5)式)。显然从 Hermite 多项式的母函数出发,有 $H_0(\xi) = \mathrm{e}^{\xi^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)^0\mathrm{e}^{-\xi^2} = 1$,$H_1(\xi) = \mathrm{e}^{\xi^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)\mathrm{e}^{-\xi^2} = 2\xi$,所以 $a_0 = \frac{1}{2}a_1$。错误的主旨思想加上错误的推导,《厄》文得出了错误的 Hermite 多项式的递推关系 $H_{n+1} - \xi H_n = -\frac{n}{2}H_{n-1}$ 和 $H_n' - nH_{n-1} = 0$(《厄》文中的(6) ~(8)式),实际上是 $H_{n+1} - 2\xi H_n = -2nH_{n-1}$ 和 $H_n' - 2nH_{n-1} = 0$,所以可以断定《厄》文在错误的推导下,强行得出了一些正确结论,应当引以为戒。

4 结语

简谐振子模型是量子力学中极其简单而又重要的模型,在本文中,笔者仅用了升降算符的代数递推关系就顺利得到了简谐振子的波函数和本征值,同时在此基础上还利用了算符对易的关系得到了 Hermite 多项式的递推关系,思路简洁清晰,一举多得,对从事量子力学教学和谐振子问题的科学研究有一定的参考和应用价值。

参考文献：

[1] 胡先权，许杰，马勇，等. 高次正幂与逆幂势函数的迭加的径向方程 Schrödinger 方程的解析解[J]. 物理学报，2007，56(9)：5060-5064.

[2] 王帮美，胡先权. 非球谐环形振子势的 Schrödinger 方程的解析解[J]. 重庆师范大学学报(自然科学版)，2008，25(2)：62-66.

[3] 曾谨言. 量子力学. 卷 I[M]. 第 2 版. 北京：科学出版社，2002.

[4] 周世勋. 量子力学教程[M]. 北京：高等教育出版社，1979：38-42.

[5] 王正行. 量子力学原理[M]. 北京：北京大学出版社，2003：55-59.

[6] 梁昆淼. 数学物理方法[M]. 第 3 版. 北京：高等教育出版社，1998：487-489.

[7] 王竹溪，郭敦仁. 特殊函数概论[M]. 北京：北京大学出版，2000：73-76.

[8] 倪致祥. 厄米本征值问题的探究[J]. 大学物理，2008，27(2)：39-41.

Algebraic Approach to Wave Function of Harmonic Oscillator and Recursion Relations of Hermite Polynomial

Wang Bang-mei, *HU Xian-quan*

(College of Physics and Information Technology, Chongqing Normal University, Chongqing 400047, China)

Abstract: Harmonic oscillator model, the physical method of which enjoys wide application in other related courses is the simplest but the most important model in quantum mechanics. On one hand, profound understanding of harmonic oscillator model through various ways is crucial to understand the essence of quantum mechanics and research into micro physical models by means of quantum mechanics; on the other hand, the application of algebraic approach to solve the eigenvalues and wave function of mechanics is the main means to solve the actual problems in quantum mechanics. This paper will take harmonic oscillator as an example, and apply algebraic approach to firstly present wave function of one-dimensional harmonic oscillator, and then multi-dimensional harmonic oscillator, and also combine corresponding commutator relations of operator to present Hermite polynomials and its recursion relations, which will avoid the process of using series to solve the equation of Heimite. Meanwhile, it will improve some shortcomings revealed in the same paper.

Key words: lowering operator and raising operator; harmonic oscillators; wave function; Hermite polynomials

(责任编辑 欧红叶)