第23卷 第4期　　上海师范大学学报(自然科学版)　　Vol. 23, No. 4
1994年12月　　J. of Shanghai Teachers Univ. (Natural Sciences)　　Dec. , 1994

线性谐振子力学量算符矩阵元通式的研究

卢书城
(物理系)

提　要　本文分别按 Weyl 规则和 Bohm 规则,给出了线性谐振子的任意力学量算符矩阵元的计算通式.现有文献中关于动力学变量的矩阵元通式可归为本文的特例.

关键词　通式;矩阵元;谐振子
中图法分类号　O413.1

0　引　言

在近代物理的各个领域中,线性谐振子常被用来作为量子客体的唯象模型,有着广泛的应用背景[1].这一方面是因为任何体系(如分子、晶体、原子核、$q\bar{q}$ 系统和玻色子场等等)的小振动,在选择适当的坐标后,往往可分解为若干个相互独立的一维谐振动,而一维谐振动又恰是量子力学可以精确求解的少数个例之一.另一方面,也许是更重要的方面,是因为谐振动可作为许多复杂运动的初级近似,在谐振子基础上,根据微扰论计算微扰力学量算符矩阵元,可以得到要求精度内的各级修正,从而得以研究各种复杂运动的性质.但是长久以来,对于线性谐振子力学量算符矩阵元的一般性研究,往往限于运用厄密多项式的递推关系、升降算符或能量表象等给出低幂次坐标和动量算符矩阵元的表式及其相互关系.1986年,M. Cohen 和 S. Kais 得到了线性谐振子任意幂次坐标算符的对角矩阵元的通式[2];1991年,文根旺将此项工作推广到非对角矩阵元的情况[3];1994年,贾祥富给出了任意幂次动量算符的矩阵元通式[4].在本文中,我们采用不同于现有文献的方法,按 Weyl 规则和 Bohm 规则,给出线性谐振子的任意力学量算符矩阵元的计算通式,而文献[2—4]的结果可归为本文所得通式的特例.考虑到本文所用的方法有一定的普遍意义,在文末,拟对本文的主要结果作一简要的讨论.

1　矩阵元的 Weyl 表述

为了保证与经典力学量 $F(x,p)$ 相对应的量子力学算符具有厄密性和唯一性,Weyl 提出一种构造量子力学算符的规则[5].Weyl 规则曾在量子多体问题的 Wigner 函数理论[6],QCD 理论[7]和孤立子理论的量子化问题[8]中起过重要的作用.该规则可表述为:

如经典力学量 $F(x,p)$ 可展开为坐标和动量的 Fourier 积分

本文于1994年8月4日收到.

$$F(x,p)=\iint_{-\infty}^{\infty}f(\zeta,\eta)e^{i\zeta x+i\eta p}\mathrm{d}\zeta\mathrm{d}\eta,\tag{1}$$

则与 $F(x,p)$ 相对应的量子力学算符为

$$\hat{F}(\hat{x},\hat{p})_w=\iint_{-\infty}^{\infty}f(\zeta,\eta)e^{i\zeta\hat{x}+i\eta\hat{p}}\mathrm{d}\zeta\mathrm{d}\eta,\tag{2}$$

此处足标 w 表示所得算符是按 Weyl 规则构造的. 由于 $\hat{x}$ 与 $\hat{p}$ 不对易,在按式(2)作具体计算时,要用到如下 Glauber 公式[9]:

$$e^{i\zeta\hat{x}+i\eta\hat{p}}=e^{i\zeta\hat{x}}e^{i\eta\hat{p}}e^{\frac{i}{2}\hbar\zeta\eta}.\tag{3}$$

若以 $|k>(k=0,1,2,\cdots,n,\cdots,m,\cdots)$ 表示线性谐振子哈密顿算符的本征矢,则本文要讨论的矩阵元为

$$\begin{aligned}<n|\hat{F}(\hat{x},\hat{p})_w|m>&=\iint_{-\infty}^{\infty}f(\zeta,\eta)<n|e^{i\zeta\hat{x}+i\eta\hat{p}}|m>\mathrm{d}\zeta\mathrm{d}\eta\\&=\sum_k\iint_{-\infty}^{\infty}f(\zeta,\eta)<n|e^{i\zeta\hat{x}}|k><k|e^{i\eta\hat{p}}|m>e^{\frac{i}{2}\hbar\zeta\eta}\mathrm{d}\zeta\mathrm{d}\eta.\end{aligned}\tag{4}$$

下面先在 x 表象中计算矩阵元 $<n|e^{i\zeta\hat{x}}|m>$. 据熟知的线性谐振子在 x 表象中的定态波函数

$$<x|k>=(\alpha/\sqrt{\pi}\,2^k k!)^{1/2}e^{-\alpha^2x^2/2}H_k(\alpha x),\ (\alpha=\sqrt{\mu\omega/\hbar})\tag{5}$$

可得

$$<n|e^{i\zeta\hat{x}}|k>=\int_{-\infty}^{\infty}<n|x>e^{i\zeta x}<x|k>\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{b!}{a!}}e^{-\zeta^2/4\alpha^2}(-\frac{\zeta^2}{2\alpha^2})^{\frac{a-b}{2}}L_b^{a-b}(\zeta^2/2\alpha^2),\tag{6}$$

其中

$$a=\max(n,k),\ b=\min(n,k).\tag{7}$$

在式(6)的推导中用到了积分公式[10]

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-(x-y)^2}H_a(x)H_b(x)\mathrm{d}x=2^a\sqrt{\pi}\,b!\,y^{a-b}L_b^{a-b}(-2y^2),$$

而广义拉盖尔多项式表为

$$L_b^{a-b}(x)=\sum_{\nu=0}^{b}\binom{a}{\nu}\frac{(-x)^{b-\nu}}{(b-\nu)!}.\tag{8}$$

矩阵元 $<k|e^{i\eta\hat{p}}|m>$ 的计算可在 p 表象中进行. 注意到在线性谐振子的哈密顿算符中 $\hat{x}$ 和 $\hat{p}$ 对称,故而 p 表象中谐振子的定态波函数除了一个相因子以外,与式(5)完全对称:

$$\begin{aligned}<p|k>&=\int_{-\infty}^{\infty}<p|x><x|k>\mathrm{d}x\\&=(-i)^k(\beta/\sqrt{\pi}\,2^k k!)^{\frac{1}{2}}e^{-\beta^2p^2/2}H_k(\beta p),\ (\beta=1/\alpha\hbar)\end{aligned}$$

用与计算式(6)相同的方法可得

$$\begin{aligned}<k|e^{i\eta\hat{p}}|m>&=\int_{-\infty}^{\infty}<k|p>e^{i\eta p}<p|m>\mathrm{d}p\\&=i^{k-m}\sqrt{\frac{d!}{c!}}e^{-\alpha^2\hbar^2\eta^2/4}(-\frac{\alpha^2\hbar^2\eta^2}{2})^{\frac{c-d}{2}}L_d^{c-d}(\frac{\alpha^2\hbar^2\eta^2}{2}).\end{aligned}\tag{9}$$

式中

$$c=\max(m,k),\ d=\min(m,k).\tag{10}$$

为了使 $\hat{F}(\hat{x},\hat{p})_w$ 的矩阵元表式可供实际运算，在将式(6)，(9)代入(4)时，利用式(8)将广义拉盖尔多项式展开，遂得

$$\begin{aligned}&<n|F(\hat{x},\hat{p})_w|m>\\&=\sum_k\sum_{j=0}^{\min(n,k)}\sum_{l=0}^{\min(m,k)}\frac{\sqrt{m!n!}k!i^{k-m}I}{j!(n-j)!(k-j)!l!(m-l)!(k-l)!}.\end{aligned}\tag{11}$$

而

$$I=\iint_{-\infty}^{\infty}f(\zeta,\eta)e^{-\frac{1}{4}(\frac{\zeta^2}{a^2}+a^2\eta^2\hbar^2)+\frac{i}{2}\hbar\zeta\eta}(-\frac{\zeta^2}{2\alpha^2})^{\frac{1}{2}(n+k)-j}(-\frac{\alpha^2\hbar^2\eta^2}{2})^{\frac{1}{2}(m+k)-l}\mathrm{d}\zeta\mathrm{d}\eta.\tag{12}$$

这就是矩阵元的 Weyl 表述．它表明，对于经典量 $F(x,p)$，只需按下式算出它的 Fourier 逆变换

$$f(\zeta,\eta)=(\frac{1}{2\pi})^2\iint_{-\infty}^{\infty}F(x,p)e^{-i\zeta x}e^{-i\eta p}\mathrm{d}x\mathrm{d}p.\tag{13}$$

代入式(12)，(11)，即可得对应的量子力学算符 $F(\hat{x},\hat{p})_w$ 在线性谐振子情况下的矩阵元通式．式中 k 的取值范围由 $F(x,p)$ 的具体形式而定，取值原则是使矩阵元之值不为零．

2 矩阵元的 Bohm 表述

构造量子力学算符的 Bohm 规则可表述为[11]：

如果经典力学量 $F(x,p)$ 可展开为坐标和动量的幂级数

$$F(x,p)=\sum_\beta\sum_\gamma f_{\beta\gamma}x^\beta p^\gamma.\tag{14}$$

则与 $F(x,p)$ 相对应的量子力学算符为

$$\hat{F}(\hat{x},\hat{p})_B=\frac{1}{2}\sum_\beta\sum_\gamma f_{\beta\gamma}(\hat{x}^\beta\hat{p}^\gamma+\hat{p}^\gamma\hat{x}^\beta).\tag{15}$$

式中足标 B 表示所得算符按 Bohm 规则构造．Bohm 规则与 Weyl 规则的特征性差别在于：对于形如 $x^\beta p^\gamma$ 的经典量，前者给出的算符只计及 $\hat{x}^\beta\hat{p}^\gamma$ 与 $\hat{p}^\gamma\hat{x}^\beta$ 两种排列方式，而后者需计及 β 个 $\hat{x}$ 和 γ 个 $\hat{p}$ 的全部不尽相异的排列方式[9]．

对于线性谐振子，矩阵元的 Bohm 表述为

$$\begin{aligned}<n|F(\hat{x},\hat{p})_B|m>&=\frac{1}{2}\sum_\beta\sum_\gamma f_{\beta\gamma}<n|(\hat{x}^\beta\hat{p}^\gamma+\hat{p}^\gamma\hat{x}^\beta)|m>\\&=\frac{1}{2}\sum_\beta\sum_\gamma f_{\beta\gamma}[\sum_k<n|\hat{x}^\beta|k><k|\hat{p}^\gamma|m>+\sum_{k'}<n|\hat{p}^\gamma|k'><k'|\hat{x}^\beta|m>].\end{aligned}\tag{16}$$

上式方括号中各矩阵元的具体形式，见本文式(23)与(24)．可以看出，与 Weyl 规则相比较，用 Bohm 规则计算算符的矩阵元，未必就更简单一些．

对于形如 $x^\beta F(p)$ 和 $p^\gamma G(x)$ 的经典量，可以证明[12]，用上述两种规则构造的量子力学算符之间存在下列关系

$$\begin{aligned}(\hat{x}^\beta\hat{F}(\hat{p}))_w&=(\hat{x}^\beta\hat{F}(\hat{p}))_B\\&+\frac{1}{2}\sum_{\mu=1}^{\beta}\binom{\beta}{\mu}(\frac{i}{2}\hbar)^\mu[\hat{x}^{\beta-\mu}F^{(\mu)}(\hat{p})+(-1)^\mu F^{(\mu)}(\hat{p})\hat{x}^{\beta-\mu}],\end{aligned}\tag{17}$$

$$\begin{aligned}(\hat{p}^\gamma\hat{G}(\hat{x}))_w&=(\hat{p}^\gamma\hat{G}(\hat{x}))_B\\&+\frac{1}{2}\sum_{\mu=1}^{\gamma}\binom{\gamma}{\mu}(\frac{i}{2}\hbar)^\mu[\hat{p}^{\gamma-\mu}G^{(\mu)}(\hat{x})+(-1)^\mu G^{(\mu)}(\hat{x})\hat{p}^{\gamma-\mu}],\end{aligned}\tag{18}$$

式中$F^{(\mu)}(\hat{p})\equiv(\frac{\partial}{\partial\xi})^{\mu}F(\xi)|_{\xi}=\hat{p}$，而$G^{(\mu)}(\hat{x})\equiv(\frac{\partial}{\partial\xi})^{\mu}G(\xi)|_{\xi}=\hat{x}$. 易知当$\beta$或$\gamma=0,1$时，按两种规则构造的算符一致，在实际计算矩阵元时可择易而为.

3 应 用

作为上文所得矩阵元通式的特例，在这里，我们将复现现有文献的结果，并讨论更为一般的情况.

(1) x^{β}

如上所述，对于本例的经典量，Weyl 表述与 Bohm 表述相同，现用 Weyl 表述式(11)来推导矩阵元的通式. 据式(13)算出x^{β}的 Fourier 逆变换

$$f(\zeta,\eta)=i^{\beta}\delta(\eta)(\frac{\partial}{\partial\zeta})^{\beta}\delta(\zeta),$$

将其代入式(12)并先对η积分. $\delta(\eta)$的作用是使式中$\eta=0$且$k=l=m$，于是有

$$<n|\hat{x}^{\beta}|m>=\sum_{j=0}^{\min(n,m)}\frac{\sqrt{m!n!}}{j!(n-j)!(m-j)!}i^{\beta+n+m-2j}$$
$$\times(\sqrt{2}a)^{2j-n-m}\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{\partial}{\partial\zeta})^{\beta}\delta(\zeta)\zeta^{n+m-2j}e^{-\zeta^{2}/4a^{2}}d\zeta. \tag{19}$$

根据积分公式(推导见附录)

$$\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{\partial}{\partial x})^{k}\delta(x)x^{m}e^{-b^{2}x^{2}+cx}H_{n}(ax)dx$$
$$=(-)^{k}k!n!\sum_{\gamma=0}^{\min(n,k-m)}\frac{(2a)^{\gamma}b^{k-m-\gamma}}{\gamma!(n-\gamma)!(k-m-\gamma)!}H_{n-\gamma}(0)H_{k-m-\gamma}(\frac{c}{2b}). \tag{20}$$

和厄密多项式的性质：

$$H_{0}(x)=1; \tag{21}$$

$$H_{2n}(0)=(-)^{n}(2n)!/n!,H_{2n+1}(0)=0. \tag{22}$$

式(19)中的积分在$\beta+n+m=$奇数时为零，而当$\beta+n+m=$正偶数(包括零，下同)时该式可化为

$$<n|\hat{x}^{\beta}|m>=(\sqrt{2}a)^{-\beta}\beta!\sum_{j=0}^{\min(n,m)}\frac{\sqrt{m!n!}}{j!(n-j)!(m-j)!(2j+\beta-n-m)!!}. \tag{23}$$

注意到$(2\lambda)!!\equiv2^{\lambda}\lambda!(\lambda=0,1,2,\cdots)$，为使式(23)所示的矩阵元不为零，还应有$j\geqslant\frac{1}{2}(n+m-\beta)$；也就是说，求和变量$j$的下限应补充为$j=\max(0,\frac{n+m-\beta}{2})$. 至此，我们得到了与文献[3]完全一致的通式；当$n=m$时，即得文献[2]的结果.

(2) p^{γ}

在式(12)中，参量ζ和η对称，故用与x^{β}相同的推导步骤即可得：

$$<n|\hat{p}^{\gamma}|m>=i^{n-m}(a\hbar/\sqrt{2})^{\gamma}\gamma!\sum_{j=\max(0,\frac{n+m-\gamma}{2})}^{\min(n,m)}\frac{\sqrt{m!n!}}{j!(n-j)!(m-j)!(2j+\gamma-n-m)!!}. \tag{24}$$

此式与文献[4]所得通式一致，但比后者更为简洁.

$\hat{x}^{\beta}$与$\hat{p}^{\gamma}$矩阵元通式的结构相同，因而它们的零矩阵元选择定则(selection rules for zero matrix-elements)也相同. 该定则可表述为

$$\beta(\gamma) + n + m = \text{奇数} \tag{25}$$

或

$$\beta(\gamma) < |n - m|. \tag{26}$$

后一条定则根据求和上限小于下限时矩阵元为零而得.

(3) $x^{\beta}p^{\gamma}$

在本例中，若 $\beta(\gamma)$ 等于0和1，则 $(\hat{x}^{\beta}\hat{p}^{\gamma})_w$ 与 $(\hat{x}^{\beta}\hat{p}^{\gamma})_B$ 相同. 不失一般性，这里讨论 $\beta(\gamma)$ 异于0,1的情况. 由式(16)可得矩阵元的 Bohm 表述

$$\begin{aligned}< n|(\hat{x}^{\beta}\hat{p}^{\gamma})_B|m > = \frac{1}{2}[\sum_k < n|\hat{x}^{\beta}|k >< k|\hat{p}^{\gamma}|m > + \\ \sum_{k'} < n|\hat{p}^{\gamma}|k' >< k'|\hat{x}^{\beta}|m >].\end{aligned} \tag{27}$$

其中各分矩阵元的计算式已在上面给出. 求和变量 k, k' 的取值范围可这样确定：为使各分矩阵元具有非零值，必须满足

$$\beta \geqslant |n - k|, \gamma \geqslant |m - k|;$$
$$\gamma \geqslant |n - k'|, \beta \geqslant |m - k'|,$$

遂得

$$\max(0, n - \beta, m - \gamma) \leq k \leq \min(n + \beta, m + \gamma), \tag{28}$$

$$\max(0, n - \gamma, m - \beta) \leq k' \leq \min(n + \gamma, m + \beta). \tag{29}$$

不难看出，使式(27)为零的条件，即零矩阵元选择定则为

$$\beta + \gamma + n + m = \text{奇数}, \tag{30}$$

或

$$\beta + \gamma < |n - m|. \tag{31}$$

Weyl 表述的矩阵元通式可据式(11)，(12)计算. 对于本例，Fourier 逆变换为

$$f(\zeta, \eta) = i^{\beta+\gamma}(\frac{\partial}{\partial\zeta})^{\beta}\delta(\zeta)(\frac{\partial}{\partial\eta})^{\gamma}\delta(\eta)$$

代入式(12)，在不同的条件（$n = 0$ 和 $c = 0$）下两次应用积分公式(20)，并将求出的结果代回式(11)，可得矩阵元的计算通式如下：

$$\begin{aligned}< n|(\hat{x}^{\beta}\hat{p}^{\gamma})_w|m > &= (\sqrt{2}\alpha)^{-\beta}(\alpha\hbar/\sqrt{2})^{\gamma}\beta!\gamma!\sqrt{n!m!} \\ &\times \sum_k \sum_j^{\min(n,k)} \sum_l^{\min(m,k)} \sum_{v(\Delta v=2)}^{\min(2j+\beta-n-k,\,2l+\gamma-m-k)} k!\,i^{k-m-v} \\ &\times 1/j!(n-j)!(k-j)!l!(m-l)!k-l)!v! \\ &\times 1/(2j+\beta-n-k-v)!!(2l+\gamma-m-k-v)!!\end{aligned} \tag{32}$$

鉴于零宗量的厄密多项式具有(22)所示的性质，$2j + \beta - n - k - v$ 和 $2l + \gamma - m - k - v$ 均须为正偶数，否则矩阵元为零. 换言之，$\beta - n - k$ 和 $\gamma - m - k$ 的奇偶性必须一致：当两者为正偶数时，v 取0,2,4,…；均为奇数时，v 取1,3,5,…，直至上限中之小者. 式(32)中 $\Delta v = 2$ 的含义即在此. 据 v 的上限必须不小于下限，可得 j, l 的取值范围为

$$\max(0, [\frac{n + k - \beta}{2}]^{+}) \leq j \leq \min(n, k). \tag{33}$$

$$\max(0, [\frac{m + k - \gamma}{2}]^{+}) \leq l \leq \min(m, k), \tag{34}$$

式中 $[\gamma]^{+}$ 为大于或等于 γ 的最小整数. 同理，由 j, l 的取值范围可确定 k 的取值范围如下：

$$\max(0,n-\beta,m-\gamma)\le k\le\min(n+\beta,m+\gamma). \tag{35}$$

从上面的分析可知,Weyl 表述的零矩阵元选择定则也可用式(30),(31)表示.受到该选择定则的制约,当 $\beta(\gamma)$ 为零时,式(27)和(32)过渡到式(24)(式(23)).

4 讨 论

(1)本文对线性谐振子,按照构造量子力学量算符的两种规则,分别给出了任意力学量算符矩阵元的计算通式.考虑到在量子力学和量子场论的若干重要的应用领域中,需要计及相关的量子力学算符的次序问题,本文将重点放在 Weyl 表述上.在本文的框架中,现有文献给出的关于线性谐振子动力学变量的矩阵元通式,可作为式(32)的特例.现有文献在推导这两个矩阵元的通式时,虽然所用方法各异,但均频繁使用求和变量的代换和求和次序的交换(须遵循严格的规则),推导方法不便于推广应用.相比之下,本文将各种量子力学算符的矩阵元通式的计算,归结为求出对应经典量的 Fourier 逆变换,这不仅扩大了应用的复盖面,而且在方法上也更为直捷明快.

(2)对本文讨论的应用实例,我们给出了零矩阵元的选择定则.如对于形如 $x^\beta p^\gamma$ 的经典量,当 $\beta+\gamma+n+m=$ 奇数或 $\beta+\gamma<|n-m|$ 时,对应的量子力学算符的矩阵元为零.所以,当 n,β 和 γ 确定后,非零的矩阵元的个数是有限的.这是因为非负整数 m 在奇偶性上必须与 $\beta+\gamma+n$ 一致,且 m 的取值范围限定在 $\beta+\gamma\geqslant|n-m|$ 之内.由此不难算出符合上述条件的 m 的个数,也即非零矩阵元的个数仅为

$$N=\min(\beta+\gamma+1,[\frac{\beta+\gamma+n+2}{2}]^-), \tag{36}$$

式中 $[\gamma]^-$ 为小于或等于 γ 的最大整数.在实际应用中,有时需要算遍全部矩阵元,才能得出结果,如用微扰论计算体系能量与波函数的高于一级的修正就是一例.在此情况下,充分利用零矩阵元选择定则,将使计算工作大为简化.

(3)本文给出的算符矩阵元的通式,虽然只对线性谐振子的哈密顿算符本征矢适用,但是导出通式的基本思路,对其他给定的力学量算符的本征矢亦然适用.对于 N 维情况,若以 $\hat{K}$ 概括地表示某个力学量算符 $\hat{K}$ 的本征矢,则计算与经典量 $F(\mathbf{r},\mathbf{p})$ 相对应的量子力学算符的相关矩阵元,可应用据式(4)改写的如下通式[12]:

$$\begin{aligned}&<n|\hat{F}(\hat{\mathbf{r}},\hat{\mathbf{p}})_w|m>\\&=\sum_k\iint_\infty f(\zeta,\bar{\eta})<n|e^{i\zeta\cdot\hat{r}}|k><k|e^{i\eta\cdot\hat{p}}|m>e^{\frac{i}{2}h\zeta\cdot\eta}d^N\zeta d^N\eta,\end{aligned}$$

其中

$$f(\zeta,\eta)=(\frac{1}{2\pi})^{2N}\iint_\infty F(\mathbf{r},\mathbf{p})e^{-i\zeta\cdot\mathbf{r}}e^{-i\eta\cdot\mathbf{p}}d^N\mathbf{r}d^N\mathbf{p}.$$

质言之,只要由 F 的具体形式算出其 Fourier 逆变换,由给定量子体系的 $\hat{K}$ 算符本征矢算出 $<n|e^{i\zeta\cdot\hat{r}}|k>$ 和 $<k|e^{i\eta\cdot p}|m>$,则本文所述的方法可移用来导出 $\hat{F}$ 算符的矩阵元通式.

附 录

$\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{\partial}{\partial x})^k\delta(x)x^m e^{-b^2x^2+cx}H_n(ax)\mathrm{d}x$ 的求积

根据 δ 函数的积分公式和莱布尼兹公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}(\frac{\partial}{\partial x})^k\delta(x-x')f(x)\mathrm{d}x=(-)^k(\frac{\partial}{\partial x'})^k f(x'),$$

$$(\frac{\partial}{\partial x})^k f(x)g(x)=\sum_{v=0}^{k}\binom{k}{v}\left[(\frac{\partial}{\partial x})^{k-v}f(x)\right]\left[(\frac{\partial}{\partial x})^v g(x)\right],$$

$$\text{原式}=(-)^k\sum_{v=0}^{k}\binom{k}{v}(\frac{\partial}{\partial x})^{k-v}(x^m e^{-b^2x^2+cx})|_{x=0}(\frac{\partial}{\partial x})^v H_n(ax)|_{x=0}. \quad (1)$$

由厄密多项式的微商递推关系可得

$$(\frac{\partial}{\partial x})^v H_n(ax)|_{x=0}=\frac{(2a)^v n!}{(n-v)!}H_{n-v}(ax)|_{x=0}$$
$$=\frac{(2a)^v n!}{(n-v)!}H_{n-v}(0); \quad (2)$$

而据厄密多项式的母函数

$$e^{-t^2+2xt}=\sum_{\mu=0}^{\infty}\frac{t^\mu}{\mu!}H_\mu(x),$$

又有

$$(\frac{\partial}{\partial x})^{k-v}(x^m e^{-b^2x^2+cx})|_{x=0}$$
$$=b^{k-m-v}\sum_{\mu=0}^{\infty}(\frac{\partial}{\partial t})^{k-v}\frac{H_\mu(c/2b)}{\mu!}t^{m+\mu}|_{t=0} \qquad (t\equiv bx)$$
$$=b^{k-m-v}\sum_{\mu=0}^{\infty}\frac{H_\mu(c/2b)}{\mu!}(m+\mu-k+v-1)_{k-v}t^{m+\mu-k+v}|_{t=0}, \quad (3)$$

式中 $(\lambda)_n\equiv\lambda(\lambda+1)\ldots(\lambda+n-1),(\lambda)_0\equiv 1.$

为了使式(3)既不发散又不为零,须有

$$\mu=k-m-v$$

将此式代入式(3),得

$$(\frac{\partial}{\partial x})^{k-v}(x^m e^{-b^2x^2+cx})|_{x=0}=\frac{b^{k-m-v}(k-v)!}{(k-m-v)!}H_{k-m-v}(\frac{c}{2b}). \quad (4)$$

再将式(2),(4)代回(1),并注意到分母上的 $(n-v)!$ 与 $(k-m-v)!$ 要求 $v\leq\min(n,m-k)$,遂得正文式(20)所示的结果.

参 考 文 献

[1] M. Moshinsky, 1969, The Harmonic Oscillator in Modern Physics: from Atoms to Quarks, Gordon and Breach, New York, M. Moshinsky, *J. Phys. A, Math. Gen.*, 1989, 22, L817

[2] M. Cohen, et al., *J. Phys. A: Math. Gen.*, 1986, 19, 683

[3] 文根旺,大学物理,1991,10(3):20

[4] 贾祥富,大学物理,1994,13(6):10

[5] H. Weyl, The Theory of Group and Quantum Mechanics, Dover, New York, 1953

[6] E. Wigner, *Phys. Rev.*, 1932, 40: 749

[7] T. D. Lee, Particle Physics and Introduction to Field Theory, Science Press, Beijing, 1981

[8] G. Eilenberg, Solitons, Mathematical Methods for Physics, Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1981

[9] 戴显熹、路兴林,北京师范大学学报,1984,3:91

[10] I. S. Gradshteyn, et al., Table of Integrals, Series and Products, Academic Press, New York, 1980: 837

[11] D. Bohm, Quantum Theory, Prentice-Hall Inc., New York, 1954: 185

[12] 卢书城,大学物理,1987,6(2):21

General Formula of Matrix Elements of Quantum Mechanical Operator for Linear Harmonic Oscillator

Lu Shucheng

(Department of Physics)

Abstract

This paper illustrates how to derive a general formula of the matrix elements of any quantum mechanical operator for linear harmonic oscillator by means of the Weyl's rule and the Bohm's rule respectively. The results given in the present references regarding general formulae of the matrix elements of dynamical variables are some special cases of our work.

Keywords general formula; matrix element; harmonic oscillator