第 59 卷 第 12 期 2010 年 12 月
1000-3290/2010/59(12)/8348-11

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 59, No. 12, December, 2010

三维各向异性耦合谐振子体系的量子化能谱与精确波函数*

凌瑞良[1)†]　冯　进[2)]　冯金福[1)]

1)(常熟理工学院物理与电子工程学院, 常熟　215500)

2)(常熟理工学院数学与统计学院, 常熟　215500)

(2009 年 10 月 6 日收到;2010 年 7 月 28 日收到修改稿)

利用二次型理论,通过三次保对易的辛变换,成功解决了三维各向异性耦合谐振子哈密顿量的对角化问题. 进一步,给出了体系的量子化能谱和精确波函数.

关键词: 各向异性, 对角化, 保对易, 正交矩阵

PACC: 0365

1. 引　　言

在基础理论研究中,含时量子谐振子系统的演化处理问题一直受到人们的普遍重视. 此问题在被广泛研究并取得相应成果的同时,另一类有关耦合谐振子的量子精确求解问题也引起了人们的广泛兴趣[1—9].

最近,文献[10—14]注意并研究了多维耦合谐振子的量子力学处理问题,明确指出耦合谐振子,特别是多维耦合谐振子的量子理论问题是求解复杂系统的理论基础,在量子理论许多领域中都有广泛应用. 耦合谐振子系统的量子力学求解,涉及的首要问题是如何将耦合谐振子系统的哈密顿量对角化. 目前哈密顿量对角化方法大致有线性量子变换法[6,7,10]、直接坐标-动量变换法[12,13]、坐标-动量积分型投影算符法[14]、简正坐标法[15]和基于占有数表象的玻戈留波夫变换法[1,16]等. 仔细分析比较可以发现,以上各种方法虽表述不同,但均与数学中实二次型标准化问题有关.

此外,还必须指出:其一,目前已有文献中哈密顿量对角化的研究对象绝大多数仅限于两个耦合谐振子系统,且耦合范围也仅是其中某些部分[2,11—14]. 其二,有些研究结果只是耦合谐振子量子化能谱[8, 15],少数结果虽既有耦合哈密顿量的本征值,又有本征函数即波函数[10,14],但遗憾的是,由于没从代数学角度在根本上寻找出量子系统新旧坐标和动量的具体变换关系式,故所给的波函数只是形式性的,不是精确解析式. 其三,即使有些文献给出了解析表达式,但变换最终给出的新坐标与新动量之间并不能保证量子力学中最基本的共轭力学量间的对易关系不变[15,17]. 为此,我们试图应用数学中二次型理论来详细研究三维各向异性耦合谐振子系统的量子力学求解问题.

2. 三维耦合谐振子哈密顿量的对角化

为方便计,仅考虑三个质量和频率均不相同,坐标具有全耦合的谐振子体系,其哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2m_1}p_1^2+\frac{1}{2m_2}p_2^2+\frac{1}{2m_3}p_3^2+\frac{m_1\omega_1^2}{2}x_1^2+\frac{m_2\omega_2^2}{2}x_2^2+\frac{m_3\omega_3^2}{2}x_3^2+\lambda_1x_1x_2+\lambda_2x_2x_3+\lambda_3x_3x_1 . \quad (1)$$

显然, H 是一个以 p_1,p_2,p_3,x_1,x_2,x_3 为未定元的六元实二次型,其矩阵形式为

$$H=(p_1,p_2,p_3,x_1,x_2,x_3)\begin{pmatrix}T_1 & O\\ O & T_2\end{pmatrix}\begin{pmatrix}p_1\\p_2\\p_3\\x_1\\x_2\\x_3\end{pmatrix} . \quad (2)$$

---

* 江苏省自然科学基金(批准号:06KJB140001)资助的课题.

† E-mail: lrl@cslg.cn

其中

$$T_1=\begin{pmatrix}\frac{1}{2m_1} & 0 & 0\\ 0 & \frac{1}{2m_2} & 0\\ 0 & 0 & \frac{1}{2m_3}\end{pmatrix},$$

$$T_2=\begin{pmatrix}\frac{m_1\omega_1^2}{2} & \frac{\lambda_1}{2} & \frac{\lambda_3}{2}\\ \frac{\lambda_1}{2} & \frac{m_2\omega_2^2}{2} & \frac{\lambda_2}{2}\\ \frac{\lambda_3}{2} & \frac{\lambda_2}{2} & \frac{m_3\omega_3^2}{2}\end{pmatrix}. \tag{3}$$

因 m_1,m_2,m_3 为物体质量,故总是非负的,且动量及坐标系统中 p_1,p_2,p_3,x_1,x_2,x_3 满足基本的对易关系

$$[x_i,p_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij},$$
$$[x_i,x_j]=[p_i,p_j]=0,$$

其中

$$\delta_{ij}=\begin{cases}1 & (i=j),\\ 0 & (i\neq j).\end{cases}$$

为了便于通过保对易关系的线性变换将(1)式化为只含平方项的二次型,先作如下线性变换:

$$(\bar{P}_1,\bar{P}_2,\bar{P}_3,\bar{X}_1,\bar{X}_2,\bar{X}_3)$$
$$=(p_1,p_2,p_3,x_1,x_2,x_3)\,W_1^{-\mathrm{T}}, \tag{4}$$

其中

$$W_1=\begin{pmatrix}M & \\ & M^{-1}\end{pmatrix},$$

$$M=\begin{pmatrix}\sqrt{2m_1} & & \\ & \sqrt{2m_2} & \\ & & \sqrt{2m_3}\end{pmatrix},$$

$$W_1^{-\mathrm{T}}=W_1^{-1}.$$

这里矩阵 $W_1^{-\mathrm{T}}$ 表示矩阵 W_1^{-1} 的转置矩阵(下面用 A^{T} 表示矩阵 A 的转置).具体的线性变换式为

$$\begin{aligned}\bar{P}_1&=\frac{1}{\sqrt{2m_1}}p_1,\\ \bar{P}_2&=\frac{1}{\sqrt{2m_2}}p_2,\\ \bar{P}_3&=\frac{1}{\sqrt{2m_3}}p_3;\\ \bar{X}_1&=\sqrt{2m_1}\,x_1,\\ \bar{X}_2&=\sqrt{2m_2}\,x_2,\\ \bar{X}_3&=\sqrt{2m_3}\,x_3.\end{aligned} \tag{5}$$

经保对易关系的线性变换(5)式,二次型(1)式可化为

$$H=(\bar{P}_1,\bar{P}_2,\bar{P}_3,\bar{X}_1,\bar{X}_2,\bar{X}_3)$$
$$\times W_1^{\mathrm{T}}\begin{pmatrix}T_1 & O\\ O & T_2\end{pmatrix}W_1\begin{pmatrix}\bar{P}_1\\ \bar{P}_2\\ \bar{P}_3\\ \bar{X}_1\\ \bar{X}_2\\ \bar{X}_3\end{pmatrix}, \tag{6}$$

其中

$$\begin{aligned}W_1^{\mathrm{T}}\begin{pmatrix}T_1 & \\ & T_2\end{pmatrix}W_1&=\begin{pmatrix}MT_1M & \\ & M^{-1}T_2M^{-1}\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}E & \\ & M^{-1}T_2M^{-1}\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}E & \\ & T_3\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{7}$$

这里 E 为三阶单位矩阵,且

$$T_3=M^{-1}T_2M^{-1}$$
$$=\begin{pmatrix}\frac{\omega_1^2}{4} & \frac{1}{\sqrt{m_1m_2}}\frac{\lambda_1}{4} & \frac{1}{\sqrt{m_1m_3}}\frac{\lambda_3}{4}\\ \frac{1}{\sqrt{m_2m_1}}\frac{\lambda_1}{4} & \frac{\omega_2^2}{4} & \frac{1}{\sqrt{m_2m_3}}\frac{\lambda_2}{4}\\ \frac{1}{\sqrt{m_3m_1}}\frac{\lambda_3}{4} & \frac{1}{\sqrt{m_3m_2}}\frac{\lambda_2}{4} & \frac{\omega_3^2}{4}\end{pmatrix}. \tag{8}$$

显然,T_3 仍为实对称矩阵.(6)式即为采用新的动量、坐标系统后原哈密顿量(1)式的二次型,(7)式为它的矩阵.

容易验证,在(1)式采用新的动量、坐标系统后,$\bar{P}_1,\bar{P}_2,\bar{P}_3,\bar{X}_1,\bar{X}_2,\bar{X}_3$ 仍然保持对易关系,即

$$\begin{aligned}[\bar{X}_i,\bar{P}_j]&=\left[\sqrt{2m_i}\,x_i,\frac{1}{\sqrt{2m_j}}p_j\right]\\ &=\sqrt{2m_i}\frac{1}{\sqrt{2m_j}}[x_i,p_j]\\ &=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij},\end{aligned}$$

$$[\bar{X}_i,\bar{X}_j]=[\bar{P}_i,\bar{P}_j]=0.$$

因 T_3 为实对称矩阵,故其本征根必为实数.不妨设 T_3 的本征根为 $\Lambda_1,\Lambda_2,\Lambda_3$,则必有实正交矩阵 Q,其列向量分别是对应于本征值 $\Lambda_1,\Lambda_2,\Lambda_3$ 的本征向量,并使

$$Q^{-1}T_3Q=Q^{\mathrm{T}}T_3Q=\begin{pmatrix}\Lambda_1&&\\&\Lambda_2&\\&&\Lambda_3\end{pmatrix}. \tag{9}$$

若设实正交矩阵

$$Q=\begin{pmatrix}a_{11}&a_{12}&a_{13}\\a_{21}&a_{22}&a_{23}\\a_{31}&a_{32}&a_{33}\end{pmatrix},$$

且记

$$W_2=\begin{pmatrix}Q&\\&Q\end{pmatrix}, \tag{10}$$

$$W_2^{-\mathrm{T}}=W_2,$$

则有正交变换

$$(\bar{\bar{P}}_1,\bar{\bar{P}}_2,\bar{\bar{P}}_3,\bar{\bar{X}}_1,\bar{\bar{X}}_2,\bar{\bar{X}}_3)=(\bar{P}_1,\bar{P}_2,\bar{P}_3,\bar{X}_1,\bar{X}_2,\bar{X}_3)W_2^{-\mathrm{T}}, \tag{11}$$

即

$$\begin{aligned}\bar{\bar{P}}_1&=a_{11}\bar{P}_1+a_{21}\bar{P}_2+a_{31}\bar{P}_3,\\\bar{\bar{P}}_2&=a_{12}\bar{P}_1+a_{22}\bar{P}_2+a_{32}\bar{P}_3,\\\bar{\bar{P}}_3&=a_{13}\bar{P}_1+a_{23}\bar{P}_2+a_{33}\bar{P}_3;\\\bar{\bar{X}}_1&=a_{11}\bar{X}_1+a_{21}\bar{X}_2+a_{31}\bar{X}_3,\\\bar{\bar{X}}_2&=a_{12}\bar{X}_1+a_{22}\bar{X}_2+a_{32}\bar{X}_3,\\\bar{\bar{X}}_3&=a_{13}\bar{X}_1+a_{23}\bar{X}_2+a_{33}\bar{X}_3.\end{aligned} \tag{12}$$

至此,可将二次型(6)式化为

$$H=(\bar{\bar{P}}_1,\bar{\bar{P}}_2,\bar{\bar{P}}_3,\bar{\bar{X}}_1,\bar{\bar{X}}_2,\bar{\bar{X}}_3)\times W_2^{\mathrm{T}}\left(W_2^{\mathrm{T}}\begin{pmatrix}T_1&O\\O&T_2\end{pmatrix}W_1\right)W_2\begin{pmatrix}\bar{\bar{P}}_1\\\bar{\bar{P}}_2\\\bar{\bar{P}}_3\\\bar{\bar{X}}_1\\\bar{\bar{X}}_2\\\bar{\bar{X}}_3\end{pmatrix}, \tag{13}$$

其中

$$W_2^{\mathrm{T}}\left(W_1^{\mathrm{T}}\begin{pmatrix}T_1&O\\O&T_2\end{pmatrix}W_1\right)W_2=\begin{pmatrix}Q^{\mathrm{T}}&\\&Q^{\mathrm{T}}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}E&\\&T_3\end{pmatrix}\begin{pmatrix}Q&\\&Q\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}E&&&\\&\Lambda_1&0&0\\&0&\Lambda_2&0\\&0&0&\Lambda_3\end{pmatrix}. \tag{14}$$

(13)式即为哈密顿量采用又一新的动量、坐标系统后(2)式的表达式,(14)式为它的矩阵.

容易验证,在(2)式采用新的动量、坐标系统后,

$$\begin{aligned}[\bar{\bar{X}}_i,\bar{\bar{P}}_j]&=[a_{1i}\bar{X}_1+a_{2i}\bar{X}_2+a_{3i}\bar{X}_3,\\&\quad a_{1j}\bar{P}_1+a_{2j}\bar{P}_2+a_{3j}\bar{P}_3]\\&=a_{1i}a_{1j}[\bar{X}_1,\bar{P}_1]+a_{2i}a_{2j}[\bar{X}_2,\bar{P}_2]\\&\quad+a_{3i}a_{3j}[\bar{X}_3,\bar{P}_3]\\&=(a_{1i}a_{1j}+a_{2i}a_{2j}+a_{3i}a_{3j})\mathrm{i}\hbar\\&=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij},\end{aligned}$$

$$[\bar{\bar{X}}_i,\bar{\bar{X}}_j]=[\bar{\bar{P}}_i,\bar{\bar{P}}_j]=0.$$

这里 $a_{1i}a_{1j}+a_{2i}a_{2j}+a_{3i}a_{3j}=\delta_{ij}$, 因为 Q 为正交矩阵, Q 的列向量组为一正交向量组,故列向量组的向量两两正交.从而,动量与坐标 $\bar{\bar{P}}_1,\bar{\bar{P}}_2,\bar{\bar{P}}_3,\bar{\bar{X}}_1,\bar{\bar{X}}_2,\bar{\bar{X}}_3$ 也满足对易关系.

为了保持(1)式动量部分原有平方系统不变,即保持 T_1 仍为原对角形矩阵,再作下列线性变换:

$$(\bar{\bar{P}}_1,\bar{\bar{P}}_2,\bar{\bar{P}}_3,\bar{\bar{X}}_1,\bar{\bar{X}}_2,\bar{\bar{X}}_3)=(P_1,P_2,P_3,X_1,X_2,X_3)W_3^{\mathrm{T}}, \tag{15}$$

其中

$$W_3=\begin{pmatrix}M^{-1}&\\&M\end{pmatrix},$$

$$W_3^{\mathrm{T}}=W_3.$$

二次型(13)式在线性变换(15)式下可化为

$$H=(P_1,P_2,P_3,X_1,X_2,X_3)\times W_3^{\mathrm{T}}\left\{W_2^{\mathrm{T}}\left(W_2^{\mathrm{T}}\begin{pmatrix}T_1&O\\O&T_2\end{pmatrix}W_1\right)W_2\right\}\times W_3\begin{pmatrix}P_1\\P_2\\P_3\\X_1\\X_2\\X_3\end{pmatrix}, \tag{16}$$

其中

$$W_3^{\mathrm{T}}\left\{W_2^{\mathrm{T}}\left(W_1^{\mathrm{T}}\begin{pmatrix}T_1&O\\O&T_2\end{pmatrix}W_1\right)W_2\right\}W_3=\begin{pmatrix}M^{-2}&\\&M\begin{pmatrix}\Lambda_1&0&0\\0&\Lambda_2&0\\0&0&\Lambda_3\end{pmatrix}M\end{pmatrix}$$

$$
=\begin{pmatrix} T_1 & & & \\ & 2m_1\Lambda_1 & & \\ & & 2m_2\Lambda_2 & \\ & & & 2m_3\Lambda_3 \end{pmatrix}. \qquad (17)
$$

这里 T_1 为(3)式中的三阶对角矩阵,(17)式为二次型(16)式的矩阵.(16)式即为(3)式采用新的动量、坐标系统后哈密顿量的矩阵表达式.同样,在(3)式采用新的动量、坐标系统后容易验证线性变换(15)式保持其对易关系不变.

经过上述一系列保对易关系的线性变换,哈密顿量二次型最终可化为不含坐标耦合的二次型

$$
H=\frac{1}{2m_1}P_1^2+\frac{1}{2m_2}P_2^2+\frac{1}{2m_3}P_3^2+2m_1\Lambda_1X_1^2 +2m_2\Lambda_2X_2^2+2m_3\Lambda_3X_3^2, \qquad (18)
$$

其中 $\Lambda_1,\Lambda_2,\Lambda_3$ 为实对称矩阵 T_3 的实本征根.(18)式即为新的动量、坐标系统下哈密顿量的具体表达式.

综合(4),(11),(15)式,若令

$$
W=W_1W_2W_3
$$

$$
=\begin{pmatrix}
\begin{matrix} a_{11} & \sqrt{\frac{m_1}{m_2}}a_{12} & \sqrt{\frac{m_1}{m_3}}a_{13} \\ \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}a_{21} & a_{22} & \sqrt{\frac{m_2}{m_3}}a_{32} \\ \sqrt{\frac{m_3}{m_1}}a_{31} & \sqrt{\frac{m_3}{m_2}}a_{32} & a_{33} \end{matrix} & \\
& \begin{matrix} a_{11} & \sqrt{\frac{m_2}{m_1}}a_{12} & \sqrt{\frac{m_3}{m_1}}a_{13} \\ \sqrt{\frac{m_1}{m_2}}a_{21} & a_{22} & \sqrt{\frac{m_3}{m_2}}a_{23} \\ \sqrt{\frac{m_1}{m_3}}a_{31} & \sqrt{\frac{m_2}{m_3}}a_{32} & a_{33} \end{matrix}
\end{pmatrix}, \qquad (19)
$$

则

$$
W^{-\mathrm{T}}=W_3W_2W_1 =\begin{pmatrix} M^{-1}QM & \\ & MQM^{-1} \end{pmatrix},
$$

且(1)式经如下线性变换后可化为(18)式:

$$
(P_1,P_2,P_3,X_1,X_2,X_3)=(p_1,p_2,p_3,x_1,x_2,x_3)W^{-\mathrm{T}}. \qquad (20)
$$

(20)式用显式表示为

$$
P_1=a_{11}p_1+\sqrt{\frac{m_1}{m_2}}a_{21}p_2+\sqrt{\frac{m_1}{m_3}}a_{31}p_3,
$$

$$
P_2=\sqrt{\frac{m_2}{m_1}}a_{12}p_1+a_{22}p_2+\sqrt{\frac{m_2}{m_3}}a_{32}p_3,
$$

$$
P_3=\sqrt{\frac{m_3}{m_1}}a_{13}p_1+\sqrt{\frac{m_3}{m_2}}a_{23}p_2+a_{33}p_3;
$$

$$
X_1=a_{11}x_1+\sqrt{\frac{m_2}{m_1}}a_{21}x_2+\sqrt{\frac{m_3}{m_1}}a_{31}x_3,
$$

$$
X_2=\sqrt{\frac{m_1}{m_2}}a_{12}x_1+a_{22}x_2+\sqrt{\frac{m_3}{m_2}}a_{32}x_3,
$$

$$
X_3=\sqrt{\frac{m_1}{m_3}}a_{13}x_1+\sqrt{\frac{m_2}{m_3}}a_{23}x_2+a_{33}x_3. \qquad (21)
$$

容易验证,对哈密顿量(1)式按(21)式进行线性变换后能保持原有的对易关系不变,

$$
[X_i,P_j]=[x_i,p_j]=\mathrm{i}\hbar\delta_{ij},
$$

$$
[X_i,X_j]=[P_i,P_j]=0.
$$

3. 体系量子化能谱与精确波函数的确定

由上述讨论可知,(1)式采用新的动量、坐标系统后哈密顿量坐标系统二次型的矩阵为 T_3,它是实对称矩阵.为了最终确定体系量子化能谱与精确波函数,必须确切算出 T_3 的特征根及将 T_3 对角化的正交矩阵 Q.

设 T_3 的特征方程为

$$|\Lambda E - T_3| = 0, \tag{22}$$

即

$$\begin{vmatrix} \Lambda - \frac{\omega_1^2}{4} & -\frac{1}{\sqrt{m_1 m_2}}\frac{\lambda_1}{4} & -\frac{1}{\sqrt{m_1 m_3}}\frac{\lambda_3}{4} \\ -\frac{1}{\sqrt{m_2 m_1}}\frac{\lambda_1}{4} & \Lambda - \frac{\omega_2^2}{4} & -\frac{1}{\sqrt{m_2 m_3}}\frac{\lambda_2}{4} \\ -\frac{1}{\sqrt{m_3 m_1}}\frac{\lambda_3}{4} & -\frac{1}{\sqrt{m_3 m_2}}\frac{\lambda_2}{4} & \Lambda - \frac{\omega_3^2}{4} \end{vmatrix} = 0. \tag{23}$$

将(23)式展开并整理后可化为

$$\Lambda^3 + A\Lambda^2 + B\Lambda + C = 0, \tag{24}$$

其中

$$\begin{aligned} A &= -\frac{1}{4}(\omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2), \\ B &= \frac{1}{16}\left(\omega_1^2\omega_2^2 + \omega_2^2\omega_3^2 + \omega_3^2\omega_1^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{\lambda_1^2}{m_1 m_2} - \frac{\lambda_2^2}{m_2 m_3} - \frac{\lambda_3^2}{m_3 m_1}\right), \\ C &= -\frac{1}{64}\left(\omega_1^2\omega_2^2\omega_3^2 - \frac{m_1\omega_1^2\lambda_2^2 + m_2\omega_2^2\lambda_3^2 + m_3\omega_3^2\lambda_1^2}{m_1 m_2 m_3} \right. \\ &\quad \left. + \frac{2\lambda_1\lambda_2\lambda_3}{m_1 m_2 m_3}\right). \end{aligned} \tag{25}$$

若记三次方程(24)的三个实根分别为 $\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3$, 则由卡丹理论[18]可推得这三个根的具体表达式(详细推导见附录).

情形Ⅰ 当 $\Delta = 0$ 时,三个实根分别为

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= 2\sqrt[3]{D} - \frac{A}{3}, \\ \Lambda_2 &= \Lambda_3 = -\sqrt[3]{D} - \frac{A}{3}, \end{aligned} \tag{26}$$

其中

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}, \\ D &= -\frac{q}{2}, \\ p &= B - \frac{A^2}{3}, \\ q &= \frac{2A^3}{27} - \frac{AB}{3} + C. \end{aligned}$$

情形Ⅱ 当 $\Delta < 0$ 时,三个实根分别为

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= 2\sqrt[3]{r}\cos\frac{\theta}{3} - \frac{A}{3}, \\ \Lambda_2 &= 2\sqrt[3]{r}\cos\frac{2\pi + \theta}{3} - \frac{A}{3}, \\ \Lambda_3 &= 2\sqrt[3]{r}\cos\frac{4\pi + \theta}{3} - \frac{A}{3}, \end{aligned} \tag{27}$$

其中

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{D^2 + (\sqrt{-\Delta})^2} \\ &= \sqrt{\frac{q^2}{4} - \Delta} \\ &= \sqrt{-\frac{p^3}{27}}, \\ \theta &= \arccos\left(\frac{D}{\sqrt{-\frac{p^3}{27}}}\right) \\ &= \arccos\left(-\frac{3q\sqrt{-3p}}{2p^2}\right). \end{aligned}$$

这里 $-\frac{3q\sqrt{-3p}}{2p^2} \in [-1, 1], \theta \in [0, \pi]$.

对于情形Ⅰ,令

$$\begin{aligned} d &= \Lambda_1 - \frac{\omega_1^2}{4}, \\ e &= \Lambda_1 - \frac{\omega_2^2}{4}, \\ f &= \Lambda_1 - \frac{\omega_3^2}{4}; \\ d' &= \Lambda_2 - \frac{\omega_1^2}{4}, \\ e' &= \Lambda_2 - \frac{\omega_2^2}{4}, \\ f' &= \Lambda_2 - \frac{\omega_3^2}{4}, \end{aligned}$$

则 Λ_1, Λ_2 所对应的特征向量分别为下列线性方程组的基础解系:

$$\begin{aligned} & dx_1 - \frac{\lambda_1}{4\sqrt{m_1 m_2}}x_2 - \frac{\lambda_3}{4\sqrt{m_1 m_3}}x_3 = 0, \\ & -\frac{\lambda_1}{4\sqrt{m_1 m_2}}x_1 + ex_2 - \frac{\lambda_2}{4\sqrt{m_2 m_3}}x_3 = 0, \\ & -\frac{\lambda_3}{4\sqrt{m_1 m_3}}x_1 - \frac{\lambda_2}{4\sqrt{m_2 m_3}}x_2 + fx_3 = 0; \\ & d'x_1 - \frac{\lambda_1}{4\sqrt{m_1 m_2}}x_2 - \frac{\lambda_3}{4\sqrt{m_1 m_3}}x_3 = 0, \\ & -\frac{\lambda_1}{4\sqrt{m_1 m_2}}x_1 + e'x_2 - \frac{\lambda_2}{4\sqrt{m_2 m_3}}x_3 = 0, \\ & -\frac{\lambda_3}{4\sqrt{m_1 m_3}}x_1 - \frac{\lambda_2}{4\sqrt{m_2 m_3}}x_2 + f'x_3 = 0. \end{aligned} \tag{28}$$

由线性方程组理论可知,方程组(28)的系数矩阵的秩分别为 2 和 1,而 Λ_1, Λ_2 对应的线性无关的特征向量分别有 1 个和 2 个. 因此,方程组(28)分别变为

$$-\frac{\lambda_1}{4\sqrt{m_1m_2}}x_1+ex_2-\frac{\lambda_2}{4\sqrt{m_2m_3}}x_3=0,$$
$$-\frac{\lambda_3}{4\sqrt{m_1m_3}}x_1-\frac{\lambda_2}{4\sqrt{m_2m_3}}x_2+fx_3=0 \tag{29}$$

和

$$d'x_1-\frac{\lambda_1}{4\sqrt{m_1m_2}}x_2-\frac{\lambda_3}{4\sqrt{m_1m_3}}x_3=0. \tag{30}$$

方程组(29)和(30)的基础解系,即对应于 Λ_1, Λ_2 的线性无关的特征向量分别为

$$\xi_1=\left(4\sqrt{m_1}ef-\frac{\sqrt{m_1}\lambda_2^2}{4m_2m_3},\frac{\lambda_2\lambda_3}{4\sqrt{m_2}m_3}+\frac{\lambda_1}{\sqrt{m_2}}e,\right.$$
$$\left.\frac{\lambda_3}{\sqrt{m_3}}f+\frac{\lambda_1\lambda_2}{4m_2\sqrt{m_3}}\right)^{\mathrm{T}}$$

和

$$\alpha_2=(\lambda_1,4d'\sqrt{m_1m_2},0)^{\mathrm{T}},$$
$$\alpha_3=(\lambda_3,0,4d'\sqrt{m_1m_3})^{\mathrm{T}}.$$

这里 ξ_1 必与 α_2,α_3 正交. 将 α_2,α_3 正交化得

$$\xi_2=\alpha_2=(\lambda_1,4d'\sqrt{m_1m_2},0)^{\mathrm{T}},$$
$$\xi_3=\alpha_3-\frac{(\xi_2,\alpha_3)}{(\xi_2,\xi_2)}\xi_2$$
$$=\left(\frac{16\lambda_3m_1m_2d'^2}{\lambda_1^2+16m_1m_2d'^2},-\frac{4\lambda_1\lambda_3d'\sqrt{m_1m_2}}{\lambda_1^2+16m_1m_2d'^2},\right.$$
$$\left.4d'\sqrt{m_1m_3}\right)^{\mathrm{T}}.$$

再将 ξ_1,ξ_2,ξ_3 单位化,得

$$\eta_1=\frac{\xi_1}{\|\xi_1\|},$$
$$\eta_2=\frac{\xi_2}{\|\xi_2\|}, \tag{31}$$
$$\eta_3=\frac{\xi_3}{\|\xi_3\|}.$$

若令 $Q=(\eta_1,\eta_2,\eta_3)$,则 Q 即为将 T_3 对角化的正交矩阵. 显然,(10)式中正交矩阵 Q 的元素 a_{ij} 均可在这里通过 η_1,η_2,η_3 找到相应的具体表达式,从而可使所求线性变换(21)式具体表示出来.

对于情形Ⅱ,令

$$d=\Lambda_1-\frac{\omega_1^2}{4},$$
$$e=\Lambda_1-\frac{\omega_2^2}{4},$$
$$f=\Lambda_1-\frac{\omega_3^2}{4};$$
$$d'=\Lambda_2-\frac{\omega_1^2}{4},$$
$$e'=\Lambda_2-\frac{\omega_2^2}{4},$$
$$f'=\Lambda_2-\frac{\omega_3^2}{4};$$
$$d''=\Lambda_3-\frac{\omega_1^2}{4},$$
$$e''=\Lambda_3-\frac{\omega_2^2}{4},$$
$$f''=\Lambda_3-\frac{\omega_3^2}{4},$$

则可分别求得特征根 $\Lambda_1,\Lambda_2,\Lambda_3$ 相对应的特征向量为

$$\zeta_1=\left(4\sqrt{m_1}ef-\frac{\sqrt{m_1}\lambda_2^2}{4m_2m_3},\frac{\lambda_2\lambda_3}{4\sqrt{m_2}m_3}+\frac{\lambda_1}{\sqrt{m_2}}e,\right.$$
$$\left.\frac{\lambda_3}{\sqrt{m_3}}f+\frac{\lambda_1\lambda_2}{4m_2\sqrt{m_3}}\right)^{\mathrm{T}},$$
$$\zeta_2=\left(\frac{\lambda_2\lambda_3}{4\sqrt{m_1}m_3}+\frac{\lambda_1}{\sqrt{m_1}}f',4\sqrt{m_2}d'f'-\frac{\sqrt{m_2}\lambda_3^2}{4m_1m_3},\right.$$
$$\left.\frac{\lambda_2}{\sqrt{m_3}}d'+\frac{\lambda_1\lambda_3}{4m_1\sqrt{m_3}}\right)^{\mathrm{T}},$$
$$\zeta_3=\left(\frac{\lambda_1\lambda_2}{4\sqrt{m_1}m_2}+\frac{\lambda_3}{\sqrt{m_1}}e'',\frac{\lambda_2}{\sqrt{m_2}}d''+\frac{\lambda_1\lambda_3}{4m_1\sqrt{m_2}},\right.$$
$$\left.4\sqrt{m_3}d''e''-\frac{\sqrt{m_3}\lambda_1^2}{4m_1m_2}\right)^{\mathrm{T}}.$$

由代数知识可知, ζ_1,ζ_2,ζ_3 为一正交向量组. 因而只需将它们单位化,即可得一标准正交组

$$\delta_1=\frac{\zeta_1}{\|\zeta_1\|},$$
$$\delta_2=\frac{\zeta_2}{\|\zeta_2\|}, \tag{32}$$
$$\delta_3=\frac{\zeta_3}{\|\zeta_3\|}.$$

同样,若令 $Q=(\delta_1,\delta_2,\delta_3)$, 则 Q 即为将 T_3 对角化的正交矩阵. 显然,(10)式中 Q 的元素 a_{ij} 也均可在这里通过 $\delta_1,\delta_2,\delta_3$ 找到相应的具体表达式,从而可使所求线性变换(21)式具体化.

至此,若在(18)式中令

$$2m_1\Lambda_1=\frac{m_1\Omega_1^2}{2},$$
$$2m_2\Lambda_2=\frac{m_2\Omega_2^2}{2},$$

$$2m_3\Lambda_3 = \frac{m_3\Omega_3^2}{2},$$

就可解得

$$\Omega_1 = 2\sqrt{\Lambda_1},$$
$$\Omega_2 = 2\sqrt{\Lambda_2}, \qquad (33)$$
$$\Omega_3 = 2\sqrt{\Lambda_3},$$

其中 $\Lambda_1, \Lambda_2, \Lambda_3$ 由(26)或(27)式确定. 于是,(1)式去耦合项后,原系统的哈密顿量可表示为

$$H = \frac{1}{2m_1}P_1^2 + \frac{1}{2m_2}P_2^2 + \frac{1}{2m_3}P_3^2 + \frac{m_1\Omega_1^2}{2}X_1^2 + \frac{m_2\Omega_2^2}{2}X_2^2 + \frac{m_3\Omega_3^2}{2}X_3^2. \qquad (34)$$

(34)式表示原耦合谐振子系统(1)式在采用新的动量、坐标系统后由三个各向异性的独立谐振子所组成. 所对应的量子系统的能量仿简单谐振子能量的公式易表示为

$$E = E_1 + E_2 + E_3 = \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)\hbar\Omega_1 + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)\hbar\Omega_2 + \left(n_3 + \frac{1}{2}\right)\hbar\Omega_3, \qquad (35)$$

其中 n_1, n_2, n_3 均为非负整数. (35)式即为本文欲求的三维各向异性耦合谐振子体系的量子化精确能谱. 显然,对应于量子化能谱(35)式的波函数可表示为

$$\Psi(X_1, X_2, X_3) = \Psi_{n_1}(X_1)\Psi_{n_2}(X_2)\Psi_{n_3}(X_3) = N_{n_1}e^{-\frac{\alpha_1^2}{2}X_1}H_{n_1}(\alpha_1X_1)N_{n_2}e^{-\frac{\alpha_2^2}{2}X_2} \times H_{n_2}(\alpha_2X_2)N_{n_3}e^{-\frac{\alpha_3^2}{2}X_3}H_{n_3}(\alpha_3X_3). \qquad (36)$$

这里

$$N_{n_1} = \left(\frac{\alpha_1}{n_1!\ 2^{n_1}\sqrt{\pi}}\right)^{1/2},$$
$$N_{n_2} = \left(\frac{\alpha_2}{n_2!\ 2^{n_2}\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}, \qquad (37)$$
$$N_{n_3} = \left(\frac{\alpha_3}{n_3!\ 2^{n_3}\sqrt{\pi}}\right)^{1/2};$$

$$\alpha_1 = \sqrt{\frac{m_1\Omega_1}{\hbar}},$$
$$\alpha_2 = \sqrt{\frac{m_2\Omega_2}{\hbar}}, \qquad (38)$$
$$\alpha_3 = \sqrt{\frac{m_3\Omega_3}{\hbar}},$$

其中 $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$ 分别由(33)式决定. 最后,若把(21)式中 $X_i(i = 1,2,3)$ 表达式代入(36)式,则可得到由哈密顿量(1)式所决定的精确波函数.

4. 哈密顿量对角化的讨论

本文所讨论对角化问题的方法与结果具有一般性,它是有关文献结论的推广.

例 1 在(1)式的哈密顿量中,令坐标耦合项系数 $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$,易求得 T_3 的本征方程 $|\Lambda E - T_3| = 0$ 的本征根为

$$\Lambda_1 = \frac{1}{8}\left\{(\omega_1^2 + \omega_2^2) - \sqrt{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + \frac{4\lambda_1^2}{m_1m_2}}\right\},$$
$$\Lambda_2 = \frac{1}{8}\left\{(\omega_1^2 + \omega_2^2) - \sqrt{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + \frac{4\lambda_1^2}{m_1m_2}}\right\},$$
$$\Lambda_3 = \frac{\omega_3^2}{4}. \qquad (39)$$

此时,(1)式去耦合项后的二次型为

$$H = \frac{1}{2m_1}P_1^2 + \frac{1}{2m_2}P_2^2 + \frac{1}{2m_3}P_3^2 + \frac{m_1}{4}\left\{(\omega_1^2 + \omega_2^2) - \sqrt{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + \frac{4\lambda_1^2}{m_1m_2}}\right\}X_1^2 + \frac{m_1}{4}\left\{(\omega_1^2 + \omega_2^2) + \sqrt{(\omega_1^2 - \omega_2^2)^2 + \frac{4\lambda_1^2}{m_1m_2}}\right\}X_3^2 + \frac{m_3\omega_3^2}{2}X_3^2. \qquad (40)$$

文献[12,13,19]给出在同时性条件下二维形式的哈密顿量为

$$H = \frac{1}{2m_1}p_1^2 + \frac{1}{2m_2}p_2^2 + \frac{m_1\omega_1^2}{2}x_1^2 + \frac{m_2\omega_2^2}{2}x_2^2 + \lambda x_1x_2 + \gamma p_1p_2. \qquad (41)$$

经文献[13]中所述保对易关系的线性变换后,(41)式可化为文献[13]中的(8)式,并且在条件 $\gamma = 0$ 时,令

$$B^2 = \sqrt{\frac{m_2}{m_1}},$$
$$A^2 = \sqrt{\frac{m_1}{m_2}}, \qquad (42)$$
$$\tan2\theta = \frac{2\lambda}{\sqrt{m_1m_2}(\omega_2^2 - \omega_1^2)},$$

(42)式即为文献[13]中的(12),(13)式,这样就可

在文献[13]的(8)式中消去坐标耦合项($\gamma=0$时无动量耦合项),于是文献[13]的(8)式可化为

$$\begin{aligned}H=&\frac{1}{2\sqrt{m_1m_2}}P_1^2+\frac{1}{2\sqrt{m_1m_2}}P_2^2\\&+\frac{1}{4}\Big(\sqrt{m_1m_2}(\omega_1^2+\omega_2^2)\\&-\sqrt{m_1m_2(\omega_1^2-\omega_2^2)^2+4\lambda^2}\Big)X_1^2\\&+\frac{1}{4}\Big(\sqrt{m_1m_2}(\omega_1^2+\omega_2^2)\\&+\sqrt{m_1m_2(\omega_1^2-\omega_2^2)^2+4\lambda^2}\Big)X_2^2.\end{aligned}\tag{43}$$

利用(42)式中的A,B表达式,(43)式可进一步化为

$$\begin{aligned}H=&\frac{1}{2m_1}A^2P_1^2+\frac{1}{2m_2}B^2P_2^2\\&+\frac{m_1}{4}\left\{(\omega_1^2+\omega_2^2)-\sqrt{(\omega_1^2-\omega_2^2)^2+\frac{4\lambda^2}{m_1m_2}}\right\}B^2X_1^2\\&+\frac{m_2}{4}\left\{(\omega_1^2+\omega_2^2)+\sqrt{(\omega_1^2-\omega_2^2)^2+\frac{4\lambda^2}{m_1m_2}}\right\}A^2X_2^2.\end{aligned}\tag{44}$$

(44)式即可视为(40)式的退化情形,两者仅相差一个保对易的线性变换.

例 2　如果在(39)式中进一步令$\omega_1=\omega_2=\omega$, $m_1=m_2=m$, 则

$$\begin{aligned}\Lambda_1&=\frac{1}{4}\left(\omega^2-\frac{\lambda_1}{m}\right),\\\Lambda_2&=\frac{1}{4}\left(\omega^2+\frac{\lambda_1}{m}\right),\\\Lambda_3&=\frac{\omega_3^2}{4}.\end{aligned}\tag{45}$$

(39)式退化形式与文献[12]中二维情形哈密顿量对角化后的形式(即文献[12]中的(5)式或文献[13]中的(1)式)在$\gamma=0$、质量与坐标均不含时时的系数表达式(6)和(7)(即文献[13]中的(40)和(41)式)完全一致.

例 3　若令

$$\begin{aligned}m_1&=m_3,\\\lambda_1&=\lambda_2=-k,\\\lambda_3&=0,\\m_1\omega_1^2&=m_3\omega_3^2=k,\\m_2\omega_2^2&=2k,\end{aligned}\tag{46}$$

则(1)式变为

$$\begin{aligned}H=&\frac{1}{2m_1}p_1^2+\frac{1}{2m_2}p_2^2+\frac{1}{2m_1}p_3^2+\frac{k}{2}x_1^2\\&+kx_2^2+\frac{k}{2}x_3^2-kx_1x_2-kx_2x_3.\end{aligned}\tag{47}$$

此即文献[20]中二氧化碳分子的哈密顿量(1)式在$m_1=m_3, a=0$时的表达式.

用本文方法计算相应的特征方程(22)的根可得

$$\begin{aligned}\Lambda_1&=\frac{k}{4m_1},\\\Lambda_2&=\frac{(2m_1+m_2)k}{4m_1m_2},\\\Lambda_3&=0.\end{aligned}\tag{48}$$

从而可解得对应的等效圆频率(33)式为

$$\begin{aligned}\Omega_1&=2\sqrt{\Lambda_1}=\sqrt{\frac{k}{m_1}},\\\Omega_2&=2\sqrt{\Lambda_2}=\sqrt{\frac{2m_1+m_2}{m_1m_2}k},\\\Omega_3&=0.\end{aligned}\tag{49}$$

这与文献[20]中的(15)式也完全一致.

由以上各例可知,本文的结果和方法具有更普遍的意义.

5. 结　　论

本文主要利用高等代数中二次型理论,紧密结合量子力学共轭力学量间特有的对易关系,通过三次保对易线性变换(实为辛变换)使三维各向异性耦合谐振子的哈密顿量有效对角化. 接着,在物理量实测性要求下,着重利用卡丹理论求解三维各向异性耦合谐振子坐标系统二次型矩阵T_3的特征根,进而由线性方程组理论求出使T_3对角化的正交矩阵Q,并在分别给出对角化哈密顿量的等效圆频率、保对易线性变换后得出的新旧坐标和新旧动量关系具体表达式的基础上,顺利确定了三维各向异性耦合谐振子体系的量子化能谱和精确波函数. 最后,在退化及特殊情形下验证了本文方法和结果的正确性. 本文的工作将为其他各种三维耦合谐振子乃至多维耦合谐振子所组成的量子系统研究打下坚实的理论基础.

附录　方程(22)三个实根的推导

记T_3的特征方程(即方程(22))为

$$|\Lambda E-T_3|=0,\tag{A1}$$

即

$$\begin{vmatrix} \Lambda - \frac{\omega_1^2}{4} & -\frac{1}{\sqrt{m_1 m_2}}\frac{\lambda_1}{4} & -\frac{1}{\sqrt{m_1 m_3}}\frac{\lambda_3}{4} \\ -\frac{1}{\sqrt{m_2 m_1}}\frac{\lambda_1}{4} & \Lambda - \frac{\omega_2^2}{4} & -\frac{1}{\sqrt{m_2 m_3}}\frac{\lambda_2}{4} \\ -\frac{1}{\sqrt{m_3 m_1}}\frac{\lambda_3}{4} & -\frac{1}{\sqrt{m_3 m_2}}\frac{\lambda_2}{4} & \Lambda - \frac{\omega_3^2}{4} \end{vmatrix} = 0. \tag{A2}$$

将(A2)式展开并整理后可化为

$$\Lambda^3 + A\Lambda^2 + B\Lambda + C = 0, \tag{A3}$$

其中

$$\begin{aligned} A &= -\frac{1}{4}(\omega_1^2 + \omega_2^2 + \omega_3^2), \\ B &= \frac{1}{16}\Big(\omega_1^2\omega_2^2 + \omega_2^2\omega_3^2 + \omega_3^2\omega_1^2 \\ &\quad - \frac{\lambda_1^2}{m_1 m_2} - \frac{\lambda_2^2}{m_2 m_3} - \frac{\lambda_3^2}{m_3 m_1}\Big), \\ C &= -\frac{1}{64}\Big(\omega_1^2\omega_2^2\omega_3^2 - \frac{m_1\omega_1^2\lambda_2^2 + m_2\omega_2^2\lambda_3^2 + m_3\omega_3^2\lambda_1^2}{m_1 m_2 m_3} \\ &\quad + \frac{2\lambda_1\lambda_2\lambda_3}{m_1 m_2 m_3}\Big). \end{aligned} \tag{A4}$$

设 $\Lambda = y - \frac{A}{3}$,代入(A3)式,消去式中的二次项并整理后可得

$$y^3 + py + q = 0, \tag{A5}$$

其中

$$p = B - \frac{A^2}{3},$$

$$q = \frac{2A^3}{27} - \frac{AB}{3} + C.$$

方程(A5)可用卡丹公式求解. 记

$$D = -\frac{q}{2},$$

$$\Delta = \frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27},$$

$$U = \sqrt[3]{D + \sqrt{\Delta}},$$

$$V = \sqrt[3]{D - \sqrt{\Delta}},$$

$$\omega = -\frac{1}{2} + \mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}.$$

这里 $\omega = -\frac{1}{2} + \mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}$ 为 1 的虚立方根,故 $\omega^2 = -\frac{1}{2} - \mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}$ 为 1 的另一个虚立方根. 所以,由卡丹公式立即可知,三次方程(A5)的三个根为

$$\begin{aligned} y_1 &= U + V, \\ y_2 &= \omega U + \omega^2 V, \\ y_3 &= \omega^2 U + \omega V. \end{aligned} \tag{A6}$$

从而,三次方程(A3)的三个根为

$$\begin{aligned} \Lambda_1 &= U + V - \frac{A}{3}, \\ \Lambda_2 &= \omega U + \omega^2 V - \frac{A}{3}, \\ \Lambda_3 &= \omega^2 U + \omega V - \frac{A}{3}. \end{aligned} \tag{A7}$$

下面讨论三次方程的实根.

1)当 $\Delta > 0$ 时,则 $U^3 = D + \sqrt{\Delta}$, $V^3 = D - \sqrt{\Delta}$ 均为实数. 因 $y_1 = U + V$ 是(A5)的根,故将其两边三次方后得

$$y_1^3 = U^3 + V^3 + 3UV(U + V),$$

即

$$y_1^3 - 3UVy_1 - (U^3 + V^3) = 0.$$

于是有

$$p = -3UV,$$

$$q = -(U^3 + V^3),$$

所以

$$U^3V^3 = -\frac{p^3}{27},$$

$$U^3 + V^3 = -q,$$

即 U^3, V^3 为一元二次方程

$$t^2 + qt - \frac{p^3}{27} = 0$$

的两个根,解得

$$U^3 = D + \sqrt{\Delta},$$

$$V^3 = D - \sqrt{\Delta}.$$

U^3 和 V^3 的三次方根各有三个,且至少各有一个实根,分别记其中的两个实根为

$$U = \sqrt[3]{D + \sqrt{\Delta}},$$

$$V = \sqrt[3]{D - \sqrt{\Delta}},$$

则 U^3, V^3 各自的三个三次方根分别为 U, ωU, $\omega^2 U$ 和 V, ωV, $\omega^2 V$.

经检验,只有 U 和 V, ωU 和 $\omega^2 V$, $\omega^2 U$ 和 ωV 搭配时才满足 $UV = -\frac{p}{3}$ 的条件,即

$$UV = -\frac{p}{3},$$

$$(\omega U)(\omega^2 V) = -\frac{p}{3},$$

$$(\omega^2 U)(\omega V) = -\frac{p}{3}.$$

由于当 $\Delta \neq 0$ 时, $U^3 \neq V^3$,从而 $U \neq V$. 所以,方程(A5)的 y_1, y_2, y_3 三个根中,只有 y_1 是实数, y_2 和 y_3 是一对共轭复数 $-\frac{1}{2}(U + V) \pm \mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}(U - V)$.

2)当 $\Delta = 0$ 时, $U = V = \sqrt[3]{D}$,方程(A5)的三个根为

$$\begin{aligned} y_1 &= U + V \\ &= 2\sqrt[3]{D}, \\ y_2 &= y_3 \\ &= \omega U + \omega^2 V \\ &= (\omega + \omega^2)\sqrt[3]{D} \\ &= -\sqrt[3]{D}, \end{aligned} \tag{A8}$$

即方程(A5)有三个实根,其中至少有两个是相等的实根.

3)当$\Delta < 0$时,即$\Delta = \frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27} < 0$,故$\frac{p^3}{27} < -\frac{q^2}{4} \leqslant 0$. 所以$p < 0$, $-\frac{p^3}{27} > 0$. 因此,$U^3 = D + \sqrt{\Delta}$,$V^3 = D - \sqrt{\Delta}$ 均为虚数. 记

$$U^3 = D + \mathrm{i}\sqrt{-\Delta},$$
$$V^3 = D - \mathrm{i}\sqrt{-\Delta},$$

其中D和$\sqrt{-\Delta}$均为实数. 将上述复数U^3和V^3用三角函数表示为

$$\begin{aligned}U^3 &= D + \mathrm{i}\sqrt{-\Delta}\\ &= \sqrt{-\frac{p^3}{27}}\left(\frac{D}{\sqrt{-\frac{p^3}{27}}} + \mathrm{i}\frac{\sqrt{-\Delta}}{\sqrt{-\frac{p^3}{27}}}\right)\\ &= r(\cos\theta + \mathrm{i}\sin\theta),\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}V^3 &= D - \mathrm{i}\sqrt{-\Delta}\\ &= \sqrt{-\frac{p^3}{27}}\left(\frac{D}{\sqrt{-\frac{p^3}{27}}} - \mathrm{i}\frac{\sqrt{-\Delta}}{\sqrt{-\frac{p^3}{27}}}\right)\\ &= r(\cos\theta - \mathrm{i}\sin\theta),\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}r &= \sqrt{D^2 + (\sqrt{-\Delta})^2}\\ &= \sqrt{\frac{q^2}{4} - \Delta}\\ &= \sqrt{-\frac{p^3}{27}},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\theta &= \arccos\left(\frac{D}{\sqrt{-\frac{p^3}{27}}}\right)\\ &= \arccos\left(-\frac{3q\sqrt{-3p}}{2p^2}\right),\end{aligned}$$

且$0 < \theta < \pi$. 记

$$U = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{\theta}{3} + \mathrm{i}\sin\frac{\theta}{3}\right),$$
$$V = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{\theta}{3} - \mathrm{i}\sin\frac{\theta}{3}\right),$$

则U^3和V^3的三个立方根分别为$U,\omega U,\omega^2 U$和$V,\omega V,\omega^2 V$.

同样,经检验,只有U和V,ωU和$\omega^2 V$,$\omega^2 U$和ωV搭配时才满足$UV = -\frac{p}{3}$的条件. 由于

$$\begin{aligned}\omega &= -\frac{1}{2} + \mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}\\ &= \cos\frac{2\pi}{3} + \mathrm{i}\sin\frac{2\pi}{3},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\omega^2 &= -\frac{1}{2} - \mathrm{i}\frac{\sqrt{3}}{2}\\ &= \cos\frac{4\pi}{3} + \mathrm{i}\sin\frac{4\pi}{3},\end{aligned}$$

故

$$U = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{\theta}{3} + \mathrm{i}\sin\frac{\theta}{3}\right),$$
$$V = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{\theta}{3} - \mathrm{i}\sin\frac{\theta}{3}\right);$$
$$\omega U = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{2\pi+\theta}{3} + \mathrm{i}\sin\frac{2\pi+\theta}{3}\right),$$
$$\omega^2 V = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{4\pi-\theta}{3} + \mathrm{i}\sin\frac{4\pi-\theta}{3}\right);$$
$$\omega^2 U = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{4\pi+\theta}{3} + \mathrm{i}\sin\frac{4\pi+\theta}{3}\right),$$
$$\omega V = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{2\pi-\theta}{3} + \mathrm{i}\sin\frac{2\pi-\theta}{3}\right).$$

因$\sin(2\pi - t) = -\sin t$, 故有

$$U = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{\theta}{3} + \mathrm{i}\sin\frac{\theta}{3}\right),$$
$$V = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{\theta}{3} - \mathrm{i}\sin\frac{\theta}{3}\right);$$
$$\omega U = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{2\pi+\theta}{3} + \mathrm{i}\sin\frac{2\pi+\theta}{3}\right),$$
$$\omega^2 V = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{2\pi+\theta}{3} - \mathrm{i}\sin\frac{2\pi+\theta}{3}\right);$$
$$\omega^2 U = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{4\pi+\theta}{3} + \mathrm{i}\sin\frac{4\pi+\theta}{3}\right),$$
$$\omega V = \sqrt[3]{r}\left(\cos\frac{4\pi+\theta}{3} - \mathrm{i}\sin\frac{4\pi+\theta}{3}\right).$$

所以方程(5)的三个根为

$$\begin{aligned}y_1 &= 2\sqrt[3]{r}\cos\frac{\theta}{3},\\ y_2 &= 2\sqrt[3]{r}\cos\frac{2\pi+\theta}{3},\\ y_3 &= 2\sqrt[3]{r}\cos\frac{4\pi+\theta}{3}.\end{aligned}\tag{A9}$$

它们都是实根.

由于哈密顿量二次型的矩阵为实对称矩阵,由矩阵知识可知,其特征根均为实数,故(A3)式中三次方程的根必定都是实数. 因此$\Delta > 0$的情形不可能出现.

---

[1] Lei X L 1983 *Chin. J. Low Temp. Phys.* **5** 264 (in Chinese) [雷啸霖 1983 低温物理学报 **5** 264]

[2] Fan H Y 1990 *Phys. Rev.* A **42** 4377

[3] Fan H Y 1993 *Phys. Rev.* A **47** 2379

[4] Michelot F 1992 *Phys. Rev.* A **45** 4271

[5] Fan H Y 1993 *Phys. Rev.* A **47** 4521

[6] Wang X B, Yu S X, Zhang Y D 1994 *J. Phys.* A **27** 6563

[7] Wang X B, Zhang Y D, Pan J W 1996 *Chin. Phys. Lett.* **13** 401

[8] Lu H X, Zhang Y D 2000 *College Phys.* **19**(5) 19 (in

Chinese)[逯怀新、张永德 2000 大学物理 **19**(5)19]

[9] Yu S X, Zhang Y D 1995 *Commun. Theor. Phys.* **24** 185

[10] Xu X W, Ren T Q, Liu S Y, Dong Y M, Zhao J D 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 535 (in Chinese)[徐秀玮、任廷琦、刘姝延、董永绵、赵继德 2006 物理学报 **55** 535]

[11] Wang X Q, Zhou L Y 2008 *Chin. J. Low Temp. Phys.* **30** 90 (in Chinese)[王晓芹、周立友 2008 低温物理学报 **30** 90]

[12] Ling R L, Feng J F 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2164 (in Chinese)[凌瑞良、冯金福 2009 物理学报 **58** 2164]

[13] Ling R L, Feng J F, Hu Y 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 759 (in Chinese)[凌瑞良、冯金福、胡 云 2010 物理学报 **59** 759]

[14] Xu S M, Xu X L, Li H Q, Wang J S 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 2174 (in Chinese)[徐世民、徐兴磊、李洪奇、王继锁 2009 物理学报 **58** 2174]

[15] Guo H Y 2006 *J. Longyan Univ.* **24** 32 (in Chinese)[郭海燕 2006 龙岩学院学报 **24** 32]

[16] Bogoliubov H H 1959 *Quantum Statistics* (Beijing: Science Press) p171 (in Chinese)[博戈留波夫 H H 1959 量子统计学(中译本)(北京:科学出版社)第 171 页]

[17] Shi G F, Hui X Q, Chen W X 2008 *College Phys.* **27**(4) 7 (in Chinese)[石国芳、惠小强、陈文学 2008 大学物理 **27**(4)7]

[18] Wang Z X, Guo D R 1979 *Theory of Special Functions* (Beijing: Science Press) p729 (in Chinese)[王竹溪、郭敦仁 1979 特殊函数概论(北京:科学出版社)第 729 页]

[19] Huang C J, Zhou M, Li C F, Fang J Y 2000 *J. At. Mol. Phys.* **17** 488 (in Chinese)[黄春佳、周 明、历春帆、方家元 2000 原子与分子物理学报 **17** 488]

[20] Zeng J Y 1981 *Quantum Mechanics* (Vol. 2) (Beijing: Science Press) p443 (in Chinese)[曾谨言 1981 量子力学(下册)(北京:科学出版社)第 443 页]

Quantized energy spectrum and exact wave function of three-dimensional anisotropic coupled harmonic oscillator*

Ling Rui-Liang[1)†] Feng Jin[2)] Feng Jin-Fu[1)]

1)(*School of Physics and Electronic Engineering, Changshu Institute of Technology, Changshu 215500, China*)

2)(*School of Mathematics and Statistics, Changshu Institute of Technology, Changshu 215500, China*)

(Received 6 October 2009; revised manuscript received 28 July 2010)

Abstract

By the quadratic form theory, we succeed in diagonalizing the Hamiltonian for three-dimensional anisotropic coupled harmonic oscillators, through three symplectic transformations keeping the commutation relations unchanged. The quantized energy spectrum and the exact wave function of the system are given.

Keywords: anisotropy, diagonalization, maintain the commutation relation, orthogonal matrix

PACC: 0365

* Project supported by the Natural Science Foundation of Jiangsu Province, China (Grant No. 06KJB140001).

† E-mail: lrl@cslg.cn