

# Theoretical Study of Energy Spectrum Condition Number of $n$ -Dimension Coupled Harmonic Oscillator\*

Ao Hu<sup>#</sup>, Zhicheng Zhong<sup>#</sup>, Shixue Ding

Physics & Electronics Engineering Department, Hubei University of Art and Science, Xiangyang  
Email: <sup>#</sup>huaomath@163.com, <sup>#</sup>zczhongf@163.com

Received: Jul. 2<sup>nd</sup>, 2012; revised: Aug. 6<sup>th</sup>, 2012; accepted: Aug. 30<sup>th</sup>, 2012

**Abstract:** This paper according to the matrix form of Schrödinger equation of  $n$ -dimension coupled harmonic oscillator, on the basis of representation theory, the element of matrix  $H_{mn}$  of Hamiltonian operator  $\hat{H}$  is derived. Through constructing one of complete normed linear space, the  $H_{mn}$  is proved to be boundedness in this space by using functional theory, and eigenvalue  $E$  of Hamiltonian operator is obtained; and then the author get the spectrum condition number formula of  $E$  that is made use of matrix theory. From this expressions, the formula of operator norm of energy  $E$  and harmonic oscillator's  $\Phi$  state is acquired. Researching the relationship between spectrum condition number of  $E$  and operator norm, the supremum and infimum of  $E$  operator norm is estimated, the reason of numerical size of energy spectrum condition number is presented. It turned out that: when the approximately range of spectrum condition number and operator norm is achieved, under the representation theory frame, the difference degree between two states of harmonic oscillator are estimated, which in terms of the exactly value of spectrum condition number, and analysis the feature states of harmonic oscillator.

**Keywords:**  $n$ -Dimension Coupling Harmonic Oscillator; Spectrum Condition Number; Operator Norm

## $n$ 维耦合谐振子的能量谱条件数理论研究\*

胡 奥<sup>#</sup>, 钟志成<sup>#</sup>, 丁世学

湖北文理学院, 物理与电子工程学院, 襄阳  
Email: <sup>#</sup>huaomath@163.com, <sup>#</sup>zczhongf@163.com

收稿日期: 2012 年 7 月 2 日; 修回日期: 2012 年 8 月 6 日; 录用日期: 2012 年 8 月 30 日

**摘 要:** 本文根据  $n$  维耦合谐振子矩阵形式的薛定谔(Schrödinger)方程, 在表象理论的基础上, 得到了哈密顿(Hamiltonian)算子  $\hat{H}$  的矩阵元  $H_{mn}$ 。通过构建一类完备的赋范线性空间, 由泛函理论, 证明了  $H_{mn}$  在此空间中是有界算子, 同时求得哈密顿算子的本征值  $E$ ; 进而利用矩阵理论得到  $E$  的谱条件数公式。从这个表达式出发, 得到了能量  $E$  的算子范数与谐振子的状态  $\Phi$  之间的关系式; 研究了  $E$  的谱条件数与算子范数之间的关系, 并估算  $E$  的算子范数上、下界的值, 给出了能量谱条件数值大小的原因。结果表明: 求出谱条件数与算子范数的大致范围, 就可以根据谱条件数的准确值, 在表象理论框架内, 估测谐振子两个状态之间的差异程度, 分析谐振子的状态特征。

**关键词:**  $n$  维耦合谐振子; 谱条件数; 算子范数

### 1. 引言

物理学的诸多领域都涉及到谐振子的问题。例如

\*资助信息: 湖北文理学院大学生科研项目(2011DXS097)。

<sup>#</sup>通讯作者。

分子振动、原子核壳层模型、晶格振动等问题都有赖于耦合谐振子的量子求解; 针对上述问题, 普遍的方法是求解不同条件下谐振子 Schrödinger 方程的波函数与本征值。文献[1]给出了  $n$  维耦合谐振子的求解。

$n$  维谐振子的定态 Schrödinger 方程:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad \left( \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_n^2 + \frac{m\omega^2}{2}\sum_{j=1}^n x_j^2 \right) \quad (1)$$

它的波函数  $\Psi$ , 可由基函数

$\Psi(\theta, r) = R_n(r)Y(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1})$  构成, 计算式中径向函数  $R_n(r)$  与  $Y(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1})$  的结果得

$$R_n(r) = N(n, l)e^{-\frac{\alpha^2 r^2}{2}} (\alpha^2 r^2)^{\frac{l+1}{2}} F\left(-n_r, l + \frac{n}{2}, \alpha^2 r^2\right)$$

$Y(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1})$  解的形式

$$Y_{\lambda_{n-1}, \lambda_{n-2}, \dots, \lambda_2, \lambda_1} = \prod_{k=1}^{n-1} \Theta_{\lambda_k, \lambda_{k-1}}(\theta_k)。$$

同时得出谐振子的本征值

$$E_N = \left(N + \frac{n}{2}\right)\hbar\omega \quad (2)$$

从结果看到,  $n$  维谐振子的波函数表达式十分复杂, 不便直观地从函数图像来考察谐振子的概率分布情况。然而我们可以利用(2)式谐振子能量的简洁表达式, 从另一角度来研究谐振子能量算子的谱。

文献[2-4]用二次型方法计算  $n$  维谐振子的本征值, 以及 Hamiltonian 量对角化的标准型。以上文献用经典方法求出的结果, 并不能深层次地了解谐振子不同状态差异的原由; 因为谐振子的能量值是由 Hamiltonian 算子  $\hat{H}$  的扰动性引起的, 扰动后算子的谱会发生变化, 这些变化会对谐振子状态产生怎样的影响?

此类问题不仅仅是算子理论中一类有意义的数学问题, 重要的是它有深刻的物理背景。本文根据表象理论, 列出  $n$  维谐振子 Hamiltonian 算子的矩阵元  $H_{mn}$ , 并证明它在巴拿赫(Banach)空间中的有界性, 由于  $H_{mn}$  与矩阵  $E$  相等, 且  $E$  中元素的值都是已知的, 故引出 Banach 空间中能量  $E$  的算子范数, 列出能量的谱条件数公式; 推演得到了谐振子能量  $E$  的算子范数与它状态  $\Phi$  之间的关系式, 并估测算子范数上、下界的值; 利用谱条件数—算子范数不等式, 分析谐振子的状态特性。

## 2. 构造 Banach 空间中能量 $E$ 的算子范数

完备的赋范线性空间称为 Banach 空间<sup>[5]</sup>。先得到一个完备的线性空间, 然后在此空间中将矩阵和向量

赋以范数。

### 2.1. Schrödinger 方程的矩阵形式

在表象理论中<sup>[6]</sup>, 波函数  $\Psi$  可展开成

$\Psi(x, t) = \sum_1^n a_n(t)u_n(x)$ , 列出算符的矩阵元公式

$$H_{mn}\Phi = E\Phi \quad \text{其中 } \Phi = (a_1, a_2, \dots, a_n)^T \quad (\text{T 表示转置}) \quad (3)$$

同时列出矩阵形式的 Schrödinger 方程

$$\begin{pmatrix} H_{11} & & & \\ & H_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & H_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \quad (4)$$

其中  $H_{mn} = \begin{pmatrix} H_{11} & & & \\ & H_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & H_{nn} \end{pmatrix}$ , 因为  $H_{mn}$  在自身表象中, 故它是一个对角矩阵。

### 2.2. 建立 $E$ 的谱条件数与算子范数之间的联系

因为波函数  $\Psi$  的本征函数:  $R_n(r)$  与  $Y(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{n-1})$  是属于希尔伯特(Hilbert)空间, 它是一类特殊的赋范空间, 记它为  $\mathbb{X}$ ; 对于  $\hat{H}$  算子有  $\hat{H}\Psi = E\Psi$ , 所以存在另一空间  $\mathbb{Y}$ , 是  $\hat{H}$  从  $\mathbb{X}$  到  $\mathbb{Y}$  的一种映射, 记为  $\hat{H}(\mathbb{X} \rightarrow \mathbb{Y})$ ; 并且  $\hat{H}(\mathbb{X} \rightarrow \mathbb{Y})$  组成的集合满足线性运算规则, 因此它构成一个线性空间, 可记为  $\mathbb{H}$ 。由于  $\mathbb{X}$ 、 $\mathbb{Y}$  都是完备空间, 所以  $\mathbb{H}$  是完备的线性空间<sup>[7,8]</sup>。

在  $\mathbb{H}$  中定义一个矩阵  $A$ ,  $A = (a_{jk})_{m \times n}$ , 按某一法则, 存在  $A$  的一个实值函数, 记为  $\|A\|$ , 并有  $\|A\| = (A^\dagger A)^{1/2}$ 。(  $A^\dagger$  表示  $A$  的埃尔米特(Hermite)共轭), 那么这个空间就是完备的赋范线性空间。

虽然  $\hat{H}$  是无界算子<sup>[9]</sup>, 考虑到实际物理模型, 取  $H_{mn}$  中的  $n$  为有限大的值, 因此  $\mathbb{H}$  是有限维空间。 $\hat{H}$  算子是  $\mathbb{X} \rightarrow \mathbb{Y}$  的映射, 用  $H_{mn}$  的范数  $\|H_{mn}\|$  来衡量这种映射的效果应该是最精确的;  $\hat{H}$  算子对应的本征值  $E$ , 在  $\mathbb{H}$  空间也可以看成一种算子, 并且是有界算子。

$$\text{将(2)式改写为 } E_n(m) = \left(m + \frac{n}{2}\right)\hbar\omega \quad (5)$$

$n$  代表谐振子的维数,  $m$  代表所在的能级 ( $m=1, 2, \dots$ ), 并且将  $m$  看作  $E_n$  的函数。由于(4)式

左边  $\mathbf{H}_{nn}$  是一个  $n \times n$  阶矩阵, 右边的  $\mathbf{E}$  也写成一个  $n$  阶方阵,

即

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_{11} & & & \\ & E_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & E_{nn} \end{pmatrix} \quad (6)$$

其中

$$E_{11} = \left(1 + \frac{n}{2}\right)\hbar\omega, E_{22} = \left(2 + \frac{n}{2}\right)\hbar\omega, \dots, E_{nn} = \left(m + \frac{n}{2}\right)\hbar\omega$$

将(6)式代入(4)式, 可得出  $H_{jj} = E_{jj}$  ( $j=1, 2, \dots, n$ )。

因为矩阵元  $\mathbf{H}_{nn}$  是由内积产生的, 它的范数  $\|\mathbf{H}_{nn}\|$  也可以由内积公式导出, 而且  $\|\mathbf{H}_{nn}\|$  和向量  $\Phi$  的范数  $\|\Phi\|$  满足下列性质<sup>[10]</sup>

$$\|\mathbf{H}_{nn}\Phi\| \leq \|\mathbf{H}_{nn}\| \cdot \|\Phi\|$$

即 
$$\|\mathbf{H}_{nn}\| \geq \frac{\|\mathbf{H}_{nn}\Phi\|}{\|\Phi\|} \quad (7)$$

由于  $\mathbf{E} = \mathbf{H}_{nn}$ , 可推得  $\mathbf{E}$  的范数  $\|\mathbf{E}\|$  也满足矩阵范数的运算法则, 用  $\|\mathbf{E}\|$  来衡量  $\hat{H}$  算子的这种映射和  $\|\mathbf{H}_{nn}\|$  得到的效果是一致的, 并且它将能量值与状态  $\Phi$  联系起来, 故用矩阵  $\mathbf{E}$  代替  $\mathbf{H}_{nn}$ 。

由(7)式引出下式<sup>[8]</sup>

$$\|\mathbf{E}\| = \max_{\|\Phi\|=1} \|\mathbf{E}\Phi\| \quad (8)$$

即可引入  $\mathbf{E}$  的谱条件数, 记为  $cond(\mathbf{E})_2$ 。由文献[10]中的定义式:

$$cond(\mathbf{E})_2 = \|\mathbf{E}\| \cdot \|\mathbf{E}^{-1}\| \quad (9)$$

之前已经知道  $E_n(m)$  的表达式, 所以  $cond(\mathbf{E})_2$  的值可以直接计算得到。

### 3. 用算子范数估计 $cond(\mathbf{E})_2$

根据(9)式的定义, 谱条件数就是算子范数中的一种, 因此  $cond(\mathbf{E})_2$  除了可以用  $\mathbf{E}$  中的元素计算, 还可以用算子范数来估计, 由(9)式

$$\|\mathbf{E}\| \cdot \|\mathbf{E}^{-1}\| = \frac{\max_{\|\Phi\|=1} \|\mathbf{E}\Phi\|}{\min_{\|\Phi\|=1} \|\mathbf{E}\Phi\|} \quad (10)$$

通过  $E_n(m)$  的表达式及范数的定义有

$$\|\mathbf{E}\Phi\| = \sqrt{\sum_{k=1}^m (E_{kk}a_k)^2},$$

根据不等式性质

$$\sqrt{\sum_{k=1}^m (E_{kk}a_k)^2} > \sqrt{\frac{1}{m} \left(\sum_{k=1}^m E_{kk}a_k\right)^2}$$

两边取自然对数,

$$\ln \sqrt{\sum_{k=1}^m (E_{kk}a_k)^2} > \ln \frac{1}{\sqrt{m}} + \ln \sum_{k=1}^m (E_{kk}a_k)^2, \quad \text{只要求出}$$

$$\ln \sum_{k=1}^m (E_{kk}a_k)^2 \text{ 的值, } \|\mathbf{E}\Phi\| \text{ 下界范围就能确定。而由于}$$

$a_k(t) = \int \Phi(x,t)u_k^*(x)d\tau$ , 准确计算此积分较为困难, 因此这里只作估计, (证明见附录 A1)结果得到

$$\|\mathbf{E}\Phi\| > \frac{\hbar\omega\gamma}{\sqrt{m}}$$

$$\left(\text{其中 } \gamma = \frac{a_1 - a_m}{(1 - a_1)^2} - \frac{ma_1a_m}{1 - a_1} + \frac{n}{2} \frac{a_1(1 - a_m)}{1 - a_1}\right) \quad (11)$$

同时  $\|\mathbf{E}\Phi\|$  还存在上界。类似上面的估算过程(证明见附录 A2), 最后计算得

$$\|\mathbf{E}\Phi\| < \left[ \left(\sum_{k=1}^m k^{2p}\right)^{\frac{1}{2p}} + \frac{n}{2} \right] \hbar\omega \quad (\text{其中 } k=1, 2, \dots, m. \quad (12)$$

$$p > 1)$$

∴ 综合可得

$$\frac{\hbar\omega\gamma}{\sqrt{m}} < \|\mathbf{E}\Phi\| < \left[ \left(\sum_{k=1}^m k^{2p}\right)^{\frac{1}{2p}} + \frac{n}{2} \right] \hbar\omega \quad (13)$$

### 4. 结果讨论

本文中  $\hat{H}$  算子的谱点是由它的本质谱与离散谱组成的<sup>[11,12]</sup>,  $\mathbf{E}$  中元素的差异程度是由算子的离散谱点产生裂变引起的。  $cond(\mathbf{E})_2$  的值反映的正是  $\mathbf{E}$  中元素的相对差异程度, 虽然用算子范数估算的值精确度不高, 但它更深层次地反映造成  $cond(\mathbf{E})_2$  值大小不同的原故。

联系(8)(10)两式, 又由算子范数的性质<sup>[13]</sup>可得

$$\max_{\|\Phi\|=1} \|\mathbf{E}\Phi\| \geq \left[ \left(\sum_{k=1}^m k^{2p}\right)^{\frac{1}{2p}} + \frac{n}{2} \right] \hbar\omega, \quad \min_{\|\Phi\|=1} \|\mathbf{E}\Phi\| \leq \frac{\hbar\omega\gamma}{\sqrt{m}}$$

进一步得

$$\text{cond}(\mathbf{E})_2 \geq \frac{\left(\sum_{k=1}^m k^{2p}\right)^{\frac{1}{2p}} + \frac{n}{2}}{\frac{\gamma}{\sqrt{m}}}, \text{ 其中 } k=1, 2, \dots, m. \quad p > 1 \quad (14)$$

谱条件数的准确值可由(6)、(9)式计算出来, 根据这个值并结合上式, 就能考察谐振子的状态  $a_1, a_m$ 、维数  $n$ 、能级束缚态  $k$ 、以及参数  $p$  之间的关系。

用波函数  $\Psi$  的解析式刻画  $n$  维耦合谐振子状态是较为困难的。当确定谐振子的维数后, 由(14)式可以更容易地估算出谐振子的低能态  $a_1$  与高能态  $a_m$  之间的差值; 这样一来, 在表象理论中分析谐振子的两个状态  $a_1, a_m$ , 就知道谐振子在此能级出现的几率, 对分析有限维 Hilbert 空间中谐振子系统有更直观的物理意义。

## 5. 致谢

感谢湖北文理学院大学生科研项目(2011DXS097)资助; 特别感谢一直指导与帮助我写作的钟老师和丁老师。

## 参考文献 (References)

- [1] 郁渭铭.  $N$  维谐振子和  $N$  维氢原子的联系[J]. 南京师大学报(自然科学版), 1990, 13(8): 28-34.
- [2] 王秀利, 张运海. 利用二次型求解  $n$  模耦合谐振子能量本征值精确解[J]. 大学物理, 2009, 28(6): 53-56.
- [3] 张仲, 卢纪材, 吴献等. 二次型方法求解坐标动量耦合的  $n$  维谐振子能量本征值[J]. 大学物理, 2011, 30(3): 11-13.
- [4] 凌瑞良, 冯进, 冯金福. 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[J]. 物理学报, 2010, 59(12): 8348-8358.
- [5] 张恭庆, 郭懋正. 泛函分析讲义(上册)[M]. 北京: 北京大学出版社, 1990: 20-67.
- [6] W. Pauli. General principles of quantum mechanics. Berlin: Springer-Verlag, 1980: 13-61.
- [7] 程其襄, 张奠宙, 魏国强等. 实变函数与泛函分析基础[M]. 北京: 高等教育出版社, 2003: 124-202.
- [8] B. K. Driver. Topology and functional analysis. San Diego: Department of Mathematics, University of California, 2001: 0112.
- [9] 张恭庆, 郭懋正. 泛函分析讲义(下册)[M]. 北京: 北京大学出版社, 1990: 45-130.
- [10] 方保镕, 周继东, 李医民. 矩阵论[M]. 北京: 清华大学出版社, 2004: 28-120.
- [11] J. J. Qi, G. S. Xu. On the spectrum of singular Hamiltonian differential systems. Annual of Differential Equations, 2005, 21(3): 389-396.
- [12] 王忠, 孙炯.  $J$ -自共轭微分算子谱的定性分析[J]. 数学进展, 2001, 30(5): 405-413.
- [13] 门少平, 封建湖. 应用泛函分析[M]. 北京: 科学出版社, 2005: 23-94.
- [14] 胡克. 解析不等式的若干问题[M]. 武汉: 武汉大学出版社, 2003: 1-37.

### 附录 A1

$$\because \ln \sqrt{\sum_{k=1}^m (E_{kk} a_k)^2} > \ln \frac{1}{\sqrt{m}} + \ln \sum_{k=1}^m (E_{kk} a_k)^2 \quad (1)$$

$$\text{有 } \sum_{k=1}^m E_{kk} a_k = \hbar \omega \sum_{k=1}^m \left(k + \frac{n}{2}\right) a_k \quad (2)$$

根据谐振子的几率特性, 当  $k$  较小时, 谐振子出现的可能性较大; 当  $k$  较大时, 出现的概率小, 即  $a_k > a_{k+1}$  ( $k$  较大时), 假定  $a_{k+1} = a_k q$ , 则(2)式可看作一个等比数列求和,

$$\sum_{k=1}^m \left(k + \frac{n}{2}\right) a_k = \sum_{k=1}^m \left(k + \frac{n}{2}\right) q^k \quad (0 < q < 1)$$

$$\text{令 } \gamma = \sum_{k=1}^m \left(k + \frac{n}{2}\right) q^k, \text{ 直接写出结果}$$

$$\gamma = \frac{q - q^{m+1}}{(1-q)^2} - \frac{mq^{m+1}}{1-q} + \frac{n}{2} \frac{q - q^{m+1}}{1-q} \text{ 将 } a_1 = q, a_m = q^m \text{ 代}$$

$$\lambda = \frac{a_1 - a_m}{(1-a_1)^2} - \frac{ma_1 a_m}{1-a_1} + \frac{n}{2} \frac{a_1(1-a_1)}{1-a_1}$$

### 附录 A2

由赫尔德(Hölder)不等式<sup>[14]</sup>:

$$\sum_{j=1}^m a_j b_j \leq \left(\sum_{j=1}^m a_j^p\right)^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{j=1}^m b_j^q\right)^{\frac{1}{q}} \left(\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1, p > 1, q > 1\right)$$

$$\therefore \sqrt{\sum_{k=1}^m (E_{kk} a_k)^2} \leq \left(\sum_{k=1}^m E_{kk}^{2p}\right)^{\frac{1}{2p}} \left(\sum_{k=1}^m a_k^{2q}\right)^{\frac{1}{2q}}. \text{ 两边取自然对数}$$

$$\therefore \ln \sqrt{\sum_{k=1}^m (E_{kk} a_k)^2} < \ln \left(\sum_{k=1}^m E_{kk}^{2p}\right)^{\frac{1}{2p}} + \ln \left(\sum_{k=1}^m a_k^{2q}\right)^{\frac{1}{2q}} \quad (3)$$

$$\because E_{kk} = \left(k + \frac{n}{2}\right) \hbar \omega, \text{ 即}$$

$$\left(\sum_{k=1}^m E_{kk}^{2p}\right)^{\frac{1}{2p}} = \hbar \omega \left[\sum_{k=1}^m \left(k + \frac{n}{2}\right)^{2p}\right]^{\frac{1}{2p}}$$

根据闵可夫斯基(Minkowski)不等式:

$$\left[\sum_{j=1}^n (a_j + b_j)^r\right]^{\frac{1}{r}} \leq \left(\sum_{j=1}^n a_j^r\right)^{\frac{1}{r}} + \left(\sum_{j=1}^n b_j^r\right)^{\frac{1}{r}} \quad (r > 1)$$

$$\therefore \left(\sum_{k=1}^m E_{kk}^{2p}\right)^{\frac{1}{2p}} \leq \hbar \omega \left(\sum_{k=1}^m k^{2p}\right)^{\frac{1}{2p}} + \frac{n}{2} \hbar \omega$$

同时利用詹森(Jensen)不等式:  $\left(\sum_{j=1}^n a_j^s\right)^{\frac{1}{s}} \leq \left(\sum_{j=1}^n a_j^r\right)^{\frac{1}{r}}$  其中  $a_j \geq 0, j = 1, 2, \dots, n, 0 < r < s$

$$\therefore (3) \text{式变成 } \ln \left[\sum_{k=1}^m (E_{kk} a_k)^2\right]^{\frac{1}{2}} < \ln \left[\left(\sum_{k=1}^m k^{2p}\right)^{\frac{1}{2p}} + \frac{n}{2}\right] \hbar \omega$$

$$\therefore \|\mathbf{E}\Phi\| < \left[\left(\sum_{k=1}^m k^{2p}\right)^{\frac{1}{2p}} + \frac{n}{2}\right] \hbar \omega \quad (p > 1) \quad (4)$$

实际上  $p$  为度量空间的维数<sup>[13]</sup>, 可以取  $q = m$ 。

$\therefore$  综合上面公式可得

$$\frac{\hbar \omega \gamma}{\sqrt{m}} < \|\mathbf{E}\Phi\| < \left[\left(\sum_{k=1}^m k^{2p}\right)^{\frac{1}{2p}} + \frac{n}{2}\right] \hbar \omega$$