2.3 一维谐振子

考虑一个弹簧，质点质量m. 势能$V(x)=\frac{1}{2}kx^2$. k是弹性系数. 粒子受力

$$f=-kx$$

.

牛顿力学告诉我们

$$-kx=m\ddot{x} \tag{2.87}$$

其解为

$$x=A\sin(\omega t+\delta) \tag{2.88}$$

$$p=m\dot{x}=m\omega A\cos(\omega t+\delta) \tag{2.89}$$

其中$\omega=\sqrt{k/m}$为自然频率，势能可以写为$V(x)=\frac{1}{2}m\omega^2x^2$. 振幅$A$由能量$E$决定: $\frac{1}{2}kA^2=E$. E可以取任意大于零的值. 相位δ由初始位置决定.

我们也可以用哈密顿力学来写运动方程, $H=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$

$$\begin{aligned}\dot{x}&=\frac{\partial H}{\partial p}=\frac{p}{m}\\ \dot{p}&=-\frac{\partial H}{\partial x}=-m\omega^2x\end{aligned} \tag{2.90}$$

前者就是动量的定义式，后者是牛顿方程。

量子力学用波函数描述谐振子的运动状态, 满足薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}=H\Psi(x,t) \tag{2.91}$$

先考虑定态情况： $\Psi(x,t)=\psi_E(x)e^{-iEt/\hbar}$. 由于势能在无穷远处是无穷大，所以系统只存在束缚态. 空间部分满足定态S-eq

$$H\psi_E(x)=E\psi_E(x) \tag{2.92}$$

即

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_E}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi_E=E\psi_E \tag{2.93}$$

两边除以$\hbar\omega/2$, 即以$\hbar\omega/2$作为单位来度量能量

$$-\frac{{\psi_E}''}{\frac{m\omega}{\hbar}}+\frac{m\omega}{\hbar}x^2\psi_E=\frac{2E}{\hbar\omega}\psi_E \tag{2.94}$$

我们知道 $[\frac{m\omega}{\hbar}]=\frac{1}{L^2}$, 这保证了两边量纲相同。

定义$m\omega/\hbar\equiv\alpha^2$, $x_0\equiv 1/\alpha$是长度，自然的长度单位！ 则$x/(1/\alpha)\equiv\xi$, 是以自然长度单位度量的长度. $\frac{1}{2}\hbar\omega$取为自然的能量单位, 那么 $\lambda\equiv E/(\frac{1}{2}\hbar\omega)$就是以自然能量单位度量的能量. 这样作也成为‘无量纲化’.

$$-\frac{\mathrm{d}^2\psi_E}{\mathrm{d}\xi^2}+\xi^2\psi_E=\lambda\psi_E \tag{2.95}$$

首先研究极限$\xi\to\pm\infty$下上面方程的渐近行为. 由于系统能量为常数, 此时可以忽略掉$\lambda\psi_E$, 方程化为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi_E}{\mathrm{d}\xi^2}-\xi^2\psi_E=0. \tag{2.96}$$

解为

$$\psi_E\propto e^{\pm\xi^2/2}. \tag{2.97}$$

(利用了此极限下$\xi^2=\xi^2\pm 1$).

考虑到束缚态要求$\psi_E\to 0$, 上式只取'-'号。

在**非无穷远处**, 我们设$\psi_E=u(\xi)e^{-\xi^2/2}$, 带入(2.95), 得到$u(\xi)$满足的方程

$$\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}\xi^2}-2\xi\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\xi}+(\lambda-1)u=0 \tag{2.98}$$

此为著名的Hermite方程。

观察可得:

$$u=c_0, \qquad \text{if } \lambda=1, \text{就是}E=\frac{1}{2}\hbar\omega \tag{2.99}$$

$$u=\xi, \qquad \text{if } \lambda=3, \text{就是}E=(1+\frac{1}{2})\hbar\omega \tag{2.100}$$

$$u=2\xi^2-1 \qquad \text{if } \lambda=5, \text{就是}E=(2+\frac{1}{2})\hbar\omega \tag{2.101}$$

这就是厄密方程的前几个解！ 注意它们的宇称性，符合对称势能的要求.

一般地, 假设无穷级数解

$$u=\sum_{k=0}^{\infty}c_k\xi^k. \tag{2.102}$$

束缚态和对称势能，导致解有宇称. 我们分别考虑:

1. 偶宇称解: $u_e=c_0+c_2\xi^2+c_4\xi^4+\cdots$
2. 奇宇称解: $u_o=c_1\xi+c_3\xi^3+c_5\xi^5\cdots$

将(2.102)带入(2.98),

$$\sum_{k=2}c_kk(k-1)\xi^{k-2}-2\xi\sum_{k=1}c_kk\xi^{k-1}+(\lambda-1)\sum_{k=0}c_k\xi^k=0 \tag{2.103}$$

改写之，让k都从零开始数起

$$\sum_{k=0}c_{k+2}(k+2)(k+1)\xi^k-2\sum_{k=0}c_kk\xi^k+(\lambda-1)\sum_{k=0}c_k\xi^k=0 \tag{2.104}$$

比较同次幂

$$c_{k+2}=\frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)}c_k \tag{2.105}$$

对于偶宇称解, 如果知道c_0,可以算出$c_2,c_4,c_6,\cdots$; 奇宇称解, 知道c_1, 可以知道$c_3,c_5,\cdots$.

但是这里藏着一个问题，我们通过偶宇称解来说明. 此时$k=2m$为偶数. 在m很大时,

$$\frac{c_{2m+2}}{c_{2m}}\to\frac{1}{m+1}. \tag{2.106}$$

我们可以看到$c_{2m}=1/m!$

当$\xi\to\infty$时, u_e中k越大的项越重要. 因此

$$u_e\approx\sum_m\frac{(\xi^2)^m}{m!}=e^{\xi^2}. \tag{2.107}$$

这导致$\psi_E=u_ee^{-\xi^2/2}$ 发散！

为避免这种情况发生，**我们必须要让无穷级数解中断为多项式(polynomial)！**

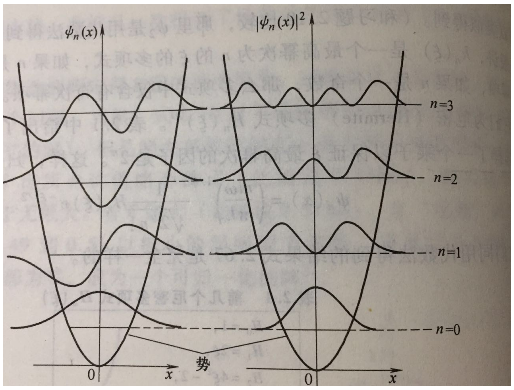

Figure 2.4: 简谐振子的能量本征态.

如果$\lambda = 2n+1$, n为整数， 那么级数解就会终止为多项式，从 而避免发散。这个多项式就是著名的Hermite 多项式$H_n(\xi)$. 按惯例, 规定最高幂的系数$c_n = 2^n$. 比如: $H_0(\xi) = 1, H_1(\xi) = 2\xi, H_2(\xi) = c_0 + c_2\xi^2 = 4\xi^2 - 2$.

这个λ是以$\frac{1}{2}\hbar\omega$为单位的能量，或者说

$$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega. \tag{2.108}$$

对应的波函数就是

$$\psi_n = N_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} = N_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}. \tag{2.109}$$

其中N_n为归一化系数:

$$N_n = (\frac{\alpha}{2^n n! \sqrt{\pi}})^{\frac{1}{2}}. \tag{2.110}$$

这可以利用厄密多项式的性质得到

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} \mathrm{d}\xi = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{m,n} \tag{2.111}$$

由此

$$\int_{\infty}^{\infty} \psi_m(x)\psi_n(x)\mathrm{d}x = \delta_{m,n} \tag{2.112}$$

这就是波函数的正交归一性。

最重要的是基态波函数

$$\psi_0 = \frac{\alpha^{\frac{1}{2}}}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \tag{2.113}$$

就是我们熟悉的高斯函数。

第一激发态

$$\psi_1(x) = \frac{(2\alpha)^{\frac{1}{2}}}{\pi^{1/4}} \alpha x e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \tag{2.114}$$

经典力学告诉我们， 给定能量E, 可以算出振子的振幅$\frac{1}{2}m\omega^2 A^2 = E$. 对于基态能量 $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$, 容易算出经典振幅$A = \sqrt{\hbar/(m\omega)} = x_0 = 1/\alpha$. 可以看到，**自然长度单位就是基态对应的**$A$.

但是按经典力学，粒子应该出现在$\pm A$之间。 量子力学告诉我们这不是真的。我们计算粒子跑出这个范围的几率

$$p = 2\int_{1/\alpha}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 \mathrm{d}x = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_1^{\infty} e^{-\xi^2}\mathrm{d}\xi \approx 0.16 \tag{2.115}$$

我们再来看第一激发态ψ_1.

首先来求最可几位置. 利用$\frac{\mathrm{d}\psi_1^2}{\mathrm{d}x}=0$,

$$\frac{\mathrm{d}(\xi^2 e^{-\xi^2})}{\mathrm{d}\xi}=0, \tag{2.116}$$

得$\xi=\pm 1$, 说明粒子在$\pm 1/\alpha$处出现几率最大。

还可以求此时的经典禁区： $\frac{1}{2}m\omega^2 A^2=\frac{3}{2}\hbar\omega$, 得到 $A=\sqrt{3}/\alpha$.

还有粒子在禁区之外出现的几率

$$p=2\int_A^\infty \psi_1^2 \mathrm{d}x=\frac{4}{\sqrt{\pi}}\int_{\sqrt{3}}^\infty \xi^2 \mathrm{e}^{-\xi^2}\mathrm{d}\xi=0.112 \tag{2.117}$$