C2-3 简谐振子模型和光子

浙江大学

课程回顾

- 定态薛定谔方程和势阱中的电子

a. 分离粒子波函数中时间项和空间项$\Psi = A_0 exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{\boldsymbol{p}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}} - Et)\right) = A_0 exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{\boldsymbol{p}}\cdot\vec{\boldsymbol{r}}\right) exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right)$得到描述定态波函数 $\psi(\vec{\boldsymbol{r}})$ 的薛定谔方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi$$

b. 定态波函数同样需要满足连续性条件和归一化条件。

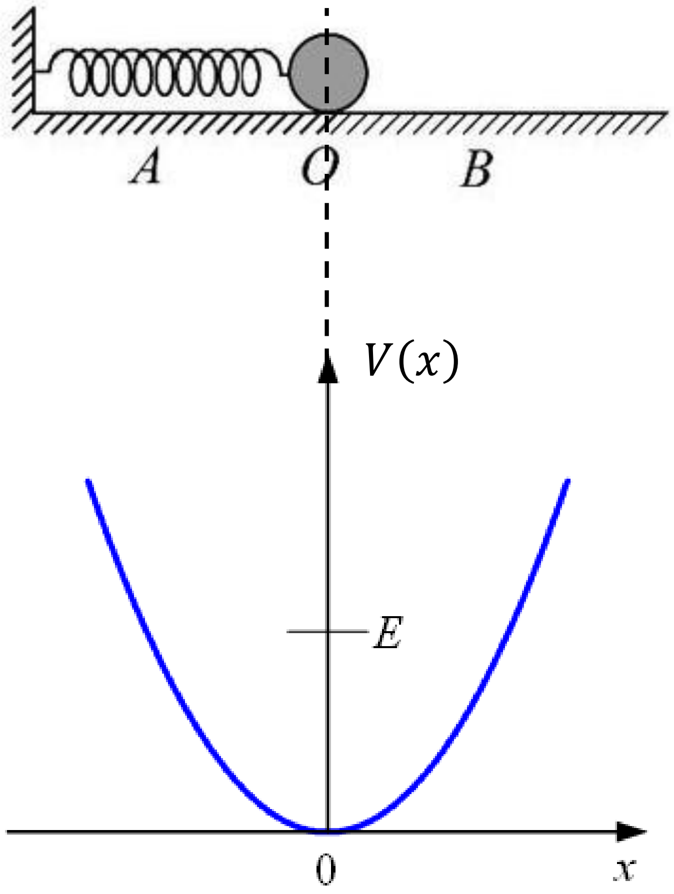
c. 求解定态薛定谔方程可以看作求解哈密顿量的本征值和本征函数的问题 $\hat{H}\psi = E\psi$

d. 求解过程分为5步：（1）列出各势域的定态方程，试探解；（2）±无穷边界；（3）区域边界条件；（4）行列式=0；（5）归一化。

e. 一维无限深势阱中电子的定态波函数求解以及量子化的能级。

f. 复杂体系可以用数值方法（以Matlab程序为例）定解。

一维简谐振子(1D-harmonic oscillator)



自然界广泛存在简谐振动，任何体系在平衡位置附近的振动，例如分子振动、晶格振动、原子核表面振动以及辐射场的振动等往往都可以分解成若干彼此独立的一维简谐振动。简谐振动往往还作为复杂运动的初步近似，所以简谐振动的研究，无论在理论上还是在应用上都很重要。

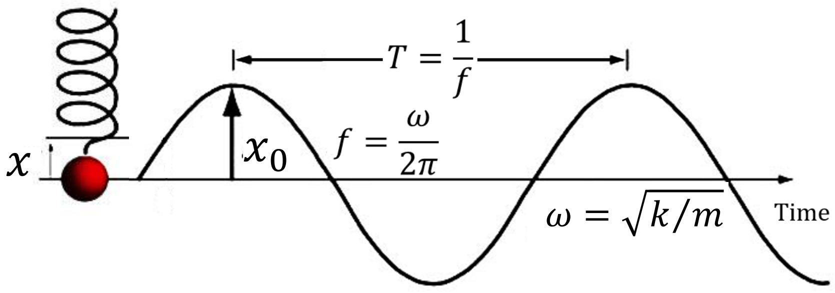
若取 $x=0$，即平衡位置处于势能零点 $V=0$，则：

$$F(x) = -\frac{dV}{dx} = -kx, \omega = \sqrt{k/m} \qquad V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

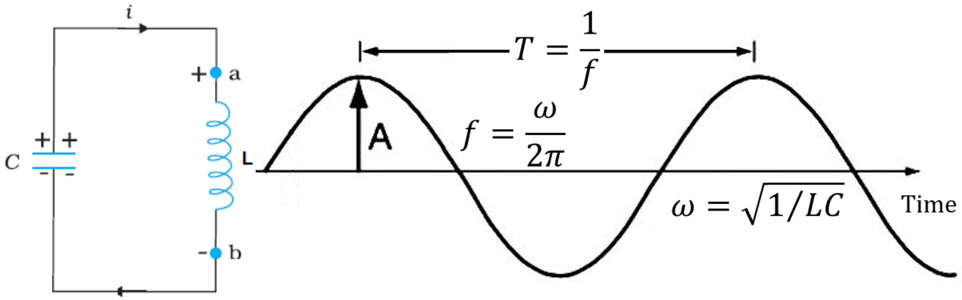
量子力学中的线性谐振子就是指在该式所描述的势场中运动的粒子。

$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

简谐振动和简谐波



弹簧振子



LC 回路

- 简谐振动所产生的波称做简谐波

简谐波的加权组合可构成任意函数

- 简谐波可以用含时的正弦和余弦函数来表示

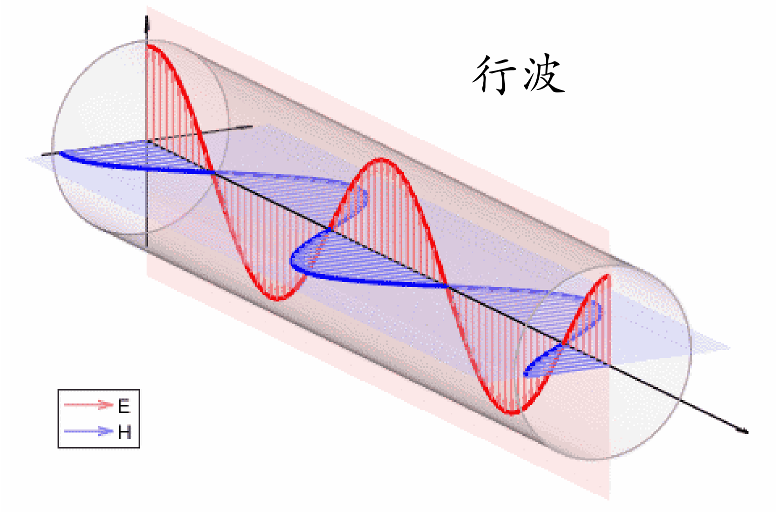
$$x(t)=x_0\sin(\omega t+\varphi)\sim x_0\sin(\omega t)$$

$$p(t)=m\frac{dx}{dt}=p_0\cos(\omega t+\varphi)\sim p_0\cos(\omega t)$$

$$p_0=m\omega x_0$$

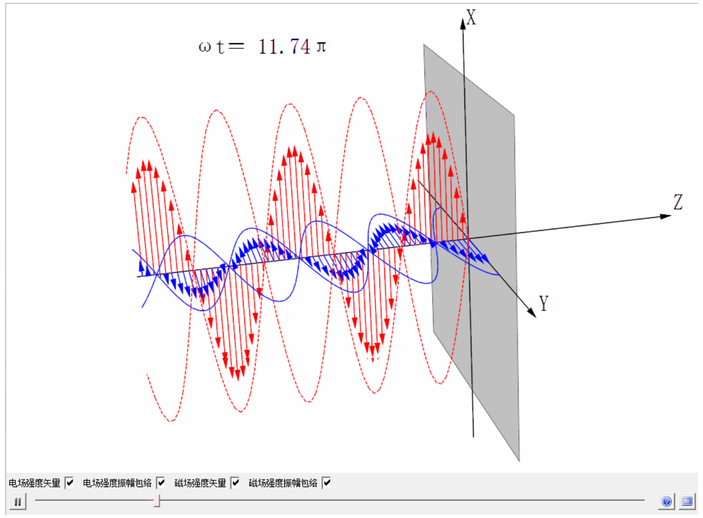
$$E=\frac{p^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2=\frac{1}{2m}p_0^2\cos^2(\omega t)+\frac{m\omega^2}{2}x_0^2\sin^2(\omega t)$$

电磁波



行波

驻波



电磁场能量密度： $U = \frac{1}{2}\varepsilon_0\mathcal{E}^2 + \frac{1}{2}\frac{B^2}{\mu_0}$

正方体V内的能量： $E = \frac{V}{4}\left(\varepsilon_0\mathcal{E}_0^2\sin^2(\omega t) + \frac{B_0^2}{\mu_0}\cos^2(\omega t)\right)$

定义：

$$\begin{cases} q(t) = \left(\dfrac{\varepsilon_0 V}{2\omega^2}\right)^{1/2} \mathcal{E}_0 \sin(\omega t) \\ p(t) = \left(\dfrac{V}{2\mu_0}\right)^{1/2} B_0 \cos(\omega t) \end{cases} \qquad B_0 = \mathcal{E}_0/c_0$$

$$\therefore E = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2)$$ 磁场和电场

经典谐振子：

$$E = \frac{1}{2}\left(\frac{p^2}{m} + m\omega^2 x^2\right)$$ 动能和势能

定态方程

一维简谐振子的定态方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi$$

令 $p\equiv\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}$

$$\frac{1}{2m}[p^2+(m\omega x)^2]\psi=E\psi$$

$$\therefore\ H=\frac{1}{2m}[p^2+(m\omega x)^2]$$

构造

$$a_\pm=\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip+m\omega x) \quad \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \text{①}$$

$$a_-a_+=\frac{1}{2\hbar m\omega}(ip+m\omega x)(-ip+m\omega x)=\frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2+(m\omega x)^2-im\omega(xp-px)]$$

引入对易关系

$$[A,B]\equiv AB-BA$$

$$\therefore\ a_-a_+=\frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2+(m\omega x)^2]-\frac{i}{2\hbar}[x,p]$$

对易关系

$$[x,p]f(x) = \left[x\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(f) - \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}(xf)\right] = \frac{\hbar}{i}\left(x\frac{df}{dx} - x\frac{df}{dx} - f\right) = i\hbar f(x)$$

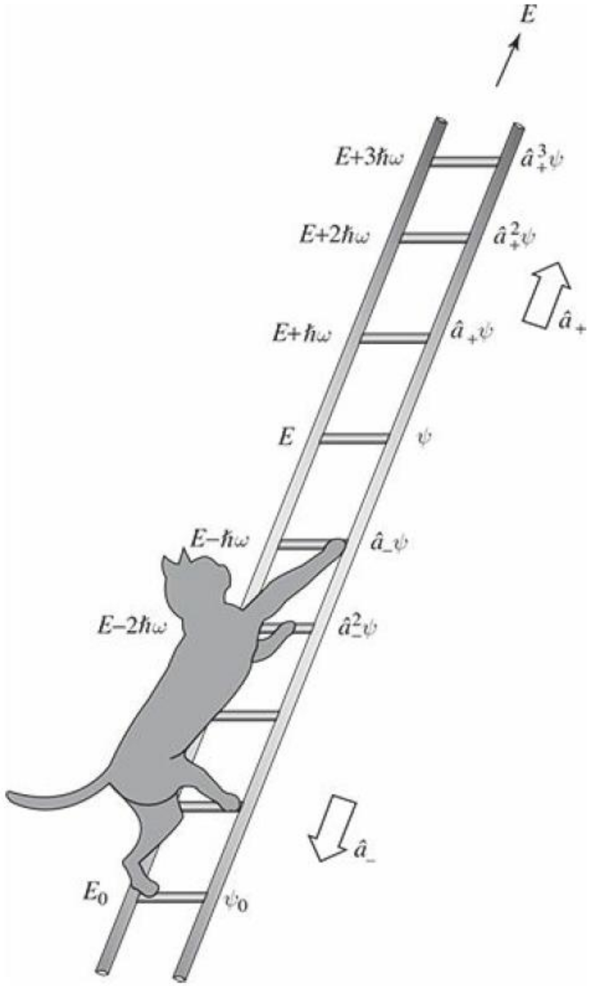
位移和动量的对易关系： $\boxed{[x,p] = i\hbar}$ ⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯ ❷

$$a_-a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}[p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\hbar}[x,p] = \frac{1}{\hbar\omega}H + \frac{1}{2}$$

$$\begin{cases} a_-a_+ = \dfrac{1}{\hbar\omega}H + \dfrac{1}{2} \\ H = \hbar\omega\left(a_-a_+ - \dfrac{1}{2}\right) \end{cases} \quad \text{或者} \quad \begin{cases} a_+a_- = \dfrac{1}{\hbar\omega}H - \dfrac{1}{2} \\ H = \hbar\omega\left(a_+a_- + \dfrac{1}{2}\right) \end{cases}$$

$a_\pm$ 的对易关系 $\boxed{[a_-,a_+] = 1}$ ⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯⋯ ❸

产生湮灭算符



$[a_-, a_+] = 1$

考虑作用在波函数上的$a_\pm$

$$H(a_+\psi) = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)(a_+\psi) = \hbar\omega\left(a_+a_-a_+ + \frac{1}{2}a_+\right)\psi = a_+\hbar\omega\left(a_-a_+ + \frac{1}{2}\right)\psi$$

$$= a_+\hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2} + 1\right)\psi = a_+(H + \hbar\omega)\psi = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$$

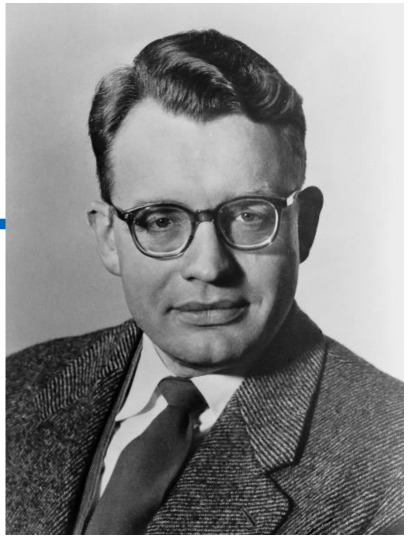
如果 ψ_1是$H\psi = E\psi$ 的解，则 $a_+\psi_1$是 $H\psi = E'\psi = (E + \hbar\omega)\psi$ 的解

$$H(a_-\psi) = \hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\right)(a_-\psi) = \hbar\omega\left(a_-a_+a_- - \frac{1}{2}a_-\right)\psi = a_-\hbar\omega\left(a_+a_- - \frac{1}{2}\right)\psi$$

$$= a_-\hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2} - 1\right)\psi = a_-(H - \hbar\omega)\psi = (E - \hbar\omega)(a_-\psi)$$

如果 ψ_2是$H\psi = E\psi$ 的解，则 $a_-\psi_2$是 $H\psi = E'\psi = (E - \hbar\omega)\psi$ 的解

零点能

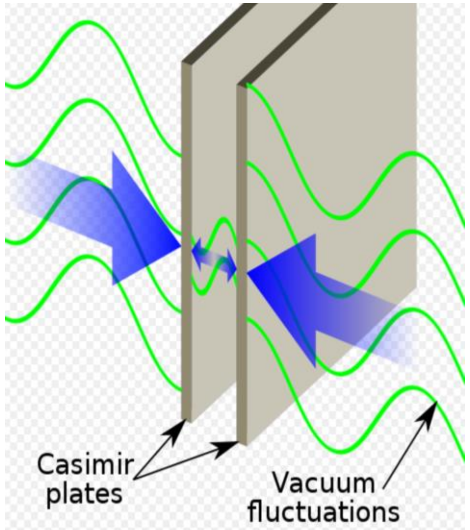


假设存在最低能级 ψ_0 $$a_-\psi_0 = 0$$

从❶式可得
$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\hbar\frac{d}{dx}+m\omega x\right)\psi_0 = 0$$

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0$$

得到
$$\psi_0(x) = Aexp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$



归一化后
$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

考虑到 $\hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)\psi_0 = E_0\psi_0$ 和 $a_-\psi_0 = 0$

$$\boldsymbol{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega}$$ **真空零点能**

粒子数算符

考虑第n个能级有

$$E_n = E_0 + n\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

定态波函数ψ_n满足

$$H\psi_n = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_n = E_n\psi_n$$

$$a_+a_-\psi_n = n\psi_n$$

粒子数算符 $$\hat{n} = a_+a_-$$

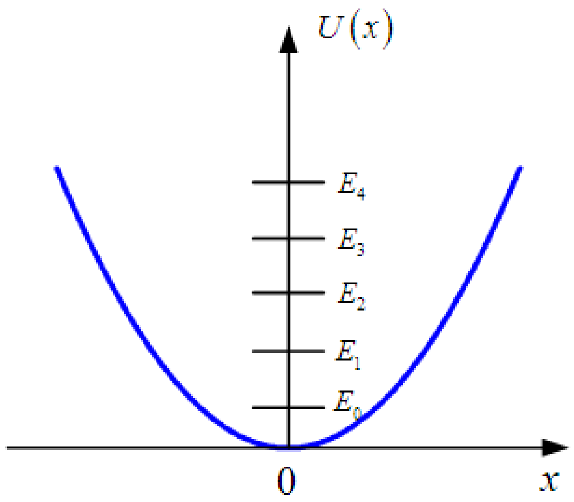
第n个波函数 $$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n\psi_0$$

简谐振子的波函数互相正交

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\psi_n dx = \delta_{mn}$$

n粒子态为能量n+1/2的本征态，其波函数构成正交完备基

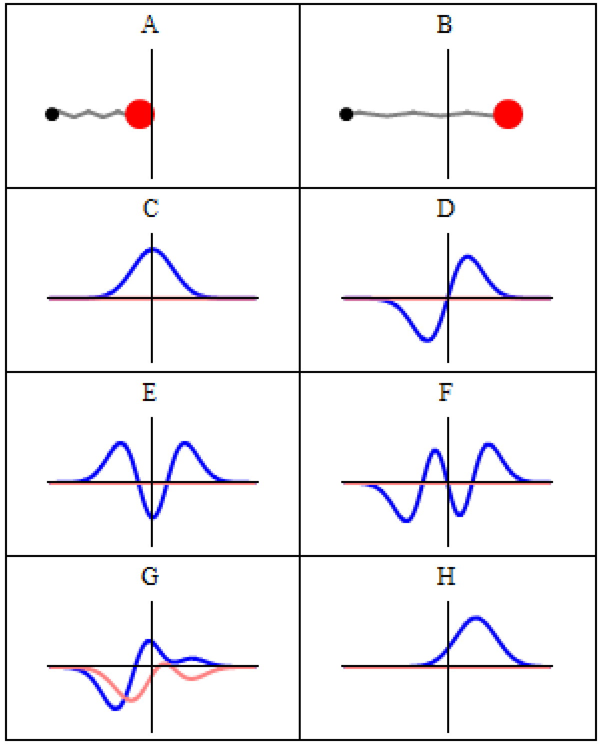
小结：简谐振子的能级



线性谐振子的能级

- 简谐振子的能量 $E_n=(n+\frac{1}{2})\hbar\omega,\ n=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$
- 能量间隔 $\Delta E=E_{n+1}-E_n=\hbar\omega$
- 零点能 $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$
- 零点能量不等于零是量子力学中特有的（不仅仅是光子），是微观粒子波粒二象性的表现，能量为零的静止的波是没有意义的。零点能也反映了空间的量子性质，绝对的真空或者孤立的空间是不存在的。

小结：简谐振子的波函数



- 波函数的波节数对应于其量子数
- 第n能级的波函数表达式 $\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n \psi_0$
- 波函数相互正交 $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}$

粒子数表象下的狄拉克符号

粒子数表象（number state representation ） $\psi_n \equiv |n\rangle$

定态薛定谔方程 $H|n\rangle = E_n|n\rangle = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle$

产生消灭算符

$$a_+|n\rangle = (n+1)^{1/2}|n+1\rangle$$
$$a_-|n\rangle = n^{1/2}|n-1\rangle$$

波函数 $|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n|0\rangle$ $a_-|0\rangle = 0$ $\boxed{\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n\psi_0}$

正交性 $\langle m|n\rangle = \delta_{mn}$

粒子数算符 $a_+a_-|n\rangle = n^{1/2}a_+|n-1\rangle = \hat{n}|n\rangle$

参考文献

- 简谐振子模型和光子主要参考：
  - 教材David J. Griffiths, and Darrell F. Schroeter, Introduction to Quantum Mechanics (3rd Edition), Cambridge University Press (2018). 第2.3小节。
  - 仲顺安等，理论物理导论（第3版），北京理工大学出版社。第2.6小节的内容。
  - 解析方法参考格里菲斯英文版 2.3.2小节