

$$e^{-x^2+2x\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} H_n(\xi). \quad (2.89)$$

利用这个公式导出 H_0 、 H_1 和 H_2 。

2.4 自由粒子

接下来我们介绍在所有情况中看起来应当是最简单的情况：自由粒子（处处 $V(x)=0$ ）。在经典理论中它意味着等速运动，但是在量子力学中这个问题变得相当微妙。定态薛定谔方程为：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi, \quad (2.90)$$

或者

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi, \text{ 其中 } k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (2.91)$$

目前为止，它与无限深方势阱的情况是相同的（式 2.21），势阱内势能也是零；现在，由下面将看到的原因，我们将用指数形式来表示其一般解：

$$\psi(x) = Ae^{ix} + Be^{-ix}. \quad (2.92)$$

与无限深方势阱不同的是现在没有边界条件去限制 k 的取值（ E 的取值）；自由粒子可以具有任何（正的）能量值。加上标准的时间因子 $\exp(-iEt/\hbar)$ ，

$$\Psi(x,t) = Ae^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m}t)} + Be^{-ik(x + \frac{\hbar k}{2m}t)}. \quad (2.93)$$

我们知道，任何函数以特定的组合 $(x \pm vt)$ 依赖变量 x 和 t （对某个常数 v ）都代表一个具有固定波形沿 $\mp x$ 方向以速度 v 传播的波。波形上一个固定点（例如，最高点或最低点）对应着宗变量的一个固定值，使得变量 x 和 t 满足

$$x \pm vt = \text{常数, 或者 } x = \mp vt + \text{常数}$$

既然波形上的每一点都以同样的速度运动，波形的形状在传播过程中是不改变的。这样式 2.93 右边的第一项代表一个向右传播的波，而第二项代表一个向左传播的波（能量相同）。顺便提及，既然这两个波的区别仅在于 k 前面的正负号，我们也可以写做

$$\Psi_k(x,t) = Ae^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}, \quad (2.94)$$

使 k 可以取负值以包括向左传播的波：

$$k \equiv \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \begin{cases} k > 0 \Rightarrow \text{向右传播,} \\ k < 0 \Rightarrow \text{向左传播.} \end{cases} \quad (2.95)$$

显然，自由粒子的“定态”是传播着的波；它们的波长是 $\lambda = 2\pi/|k|$ ，按照德布罗意公式（式 1.39）它们具有动量

$$p = \hbar k. \quad (2.96)$$

这些波的速度（ t 前面的系数除以 x 前面的系数）是

$$v_{\text{quantum}} = \frac{\hbar |k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}. \quad (2.97)$$

另一方面，一个具有能量 $E = (1/2)mv^2$ （纯动能，因为势能 $V=0$ ）的经典自由粒子的速度是

$$v_{\text{classical}} = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 2v_{\text{quantum}} \quad (2.98)$$

表面看来,量子状态波函数的传播速度只有它所代表的粒子经典速度的一半!我们马上会讨论这个佯谬问题——这里还有一个更严重的问题需要我们首先面对:这个波函数是不可归一化的。因为

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^* \Psi_k dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = |A|^2 (\infty). \quad (2.99)$$

对自由粒子来讲,分离变量解并不代表物理上可实现的态。一个自由粒子不能存在于一个定态;或者,换句话说,不存在一个自由粒子具有确定能量这样的事情。

但是这并不意味着分离变量解对我们没有用途,因为它们的数学地位是完全不依赖于它们的物理解释的。含时薛定谔方程的一般解仍旧是分离变量解的线性组合(此时对连续变量 k 的一个积分取代了对分立指标 n 的求和):

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} dk. \quad (2.100)$$

(为了方便引入因子 $1/\sqrt{2\pi}$; 在式 2.17 中 c_n 现在所扮演的角色是组合 $(1/\sqrt{2\pi})\phi(k)dk$ 。) 现在这个波函数是可以归一化的(对适当的 $\phi(k)$)。但是必须是限制在 k 值的一个范围,因此能量和速度也有一个范围。我们称这样的波为波包³²。

在量子力学问题中,一般是给出 $\Psi(x, 0)$, 求解 $\Psi(x, t)$ 。对自由粒子的式 2.100 的形式解,仅有的问题是如何确定匹配初始波函数的 $\phi(k)$:

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk. \quad (2.101)$$

这是傅里叶变换中的一个经典问题;答案由普朗克尔(Plancherel)定理提供(见习题 2.20):

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk \Leftrightarrow F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx. \quad (2.102)$$

$F(k)$ 称为 $f(x)$ 的傅里叶变换; $f(x)$ 称为 $F(k)$ 的傅里叶逆变换(两者仅有的差别是指数的正负号)。当然,对所允许的函数需要加上某些限制:也就是积分必须存在³³。对我们的目的而言,这一点可由 $\Psi(x, 0)$ 本身是归一化的来保证。所以,对式 2.100 中自由粒子一般问题的解是,

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x, 0) e^{-ikx} dx. \quad (2.103)$$

例题 2.6 一个自由粒子初始时刻局域在区间 $-a < x < a$, 然后在 $t=0$ 释放:

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} A, & \text{如果 } -a < x < a, \\ 0, & \text{其他地方,} \end{cases}$$

式中 A 和 a 都是正的实数。求 $\Psi(x, t)$ 。

解: 首先我们需要归一化 $\Psi(x, 0)$:

³² 正弦波扩展到无限远,它们是不可归一化的。但是这样波的叠加会产生干涉,从而是可以局域化和归一化的。

³³ 对 $f(x)$ 充分必要条件是积分 $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx$ 为有限的。(在这种情况下 $\int_{-\infty}^{+\infty} |F(k)|^2 dx$ 也是有限的,事实上两个积分是相等的。) 参见 Arfken (脚标 24), 15.5 节。

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx = |A|^2 \int_{-a}^a dx = 2a |A|^2 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{2a}}$$

其次我们利用式 2.103 计算 $\phi(k)$ ：

$$\begin{aligned} \phi(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2a}} \int_{-a}^a e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \frac{e^{-ikx}}{-ik} \Big|_{-a}^a \\ &= \frac{1}{k\sqrt{\pi a}} \left(\frac{e^{ika} - e^{-ika}}{2i} \right) = \frac{1}{\sqrt{\pi a}} \frac{\sin(ka)}{k}. \end{aligned}$$

最后把 $\phi(k)$ 代回式 2.100 中：

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\pi \sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin(ka)}{k} e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} dk. \quad (2.104)$$

遗憾的是，尽管这个积分可以用数值积分计算（图 2.8），但它不能积成一个基本函数。（事实上， $\Psi(x, t)$ 的积分只有很少情况可以严格积出；一个特别优美的例子参见习题 2.22。）

探讨上式的极限情况很有启发。如果 a 非常小，初始波函数为很窄的针状（图 2.9 (a)）。在这种情况下， $\sin(ka) \approx ka$ ，我们有

$$\phi(k) \approx \sqrt{\frac{a}{\pi}};$$

分母分子中的 k 约去， $\phi(k)$ 变得很平坦（图 2.9 (b)）。这就是不确定原理的一个例子：如果坐标的弥散很小，动量的弥散（ k 的——见式 2.96）必须很大。

在另一种极限下（ a 很大），坐标的弥散很大（图 2.10 (a)），而

$$\phi(k) = \sqrt{\frac{a}{\pi}} \frac{\sin(ka)}{ka}.$$

现在， $\sin z/z$ 的最大值在 $z=0$ ，并当 $z = \pm\pi$ 时为零（这对应 $k = \pm\pi/a$ ）。所以对较大的 a ， $\phi(k)$ 是以 $k=0$ 为中心的一个窄峰（图 2.10 (b)）。此种情况下，有一个较为确定的动量，

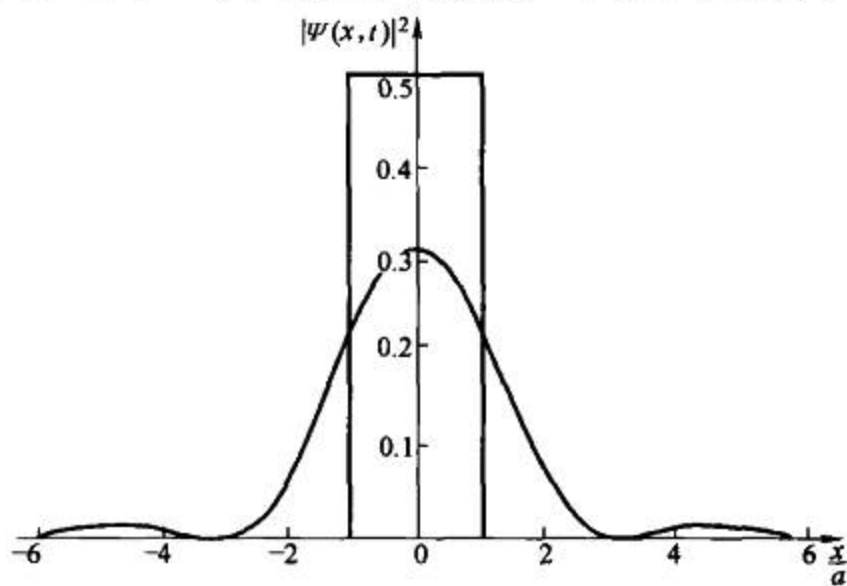


图 2.8 $|\Psi(x, t)|^2$ 在 $t=0$ (矩形) 和 $t = ma^2/\hbar$ (曲线) 时的图形

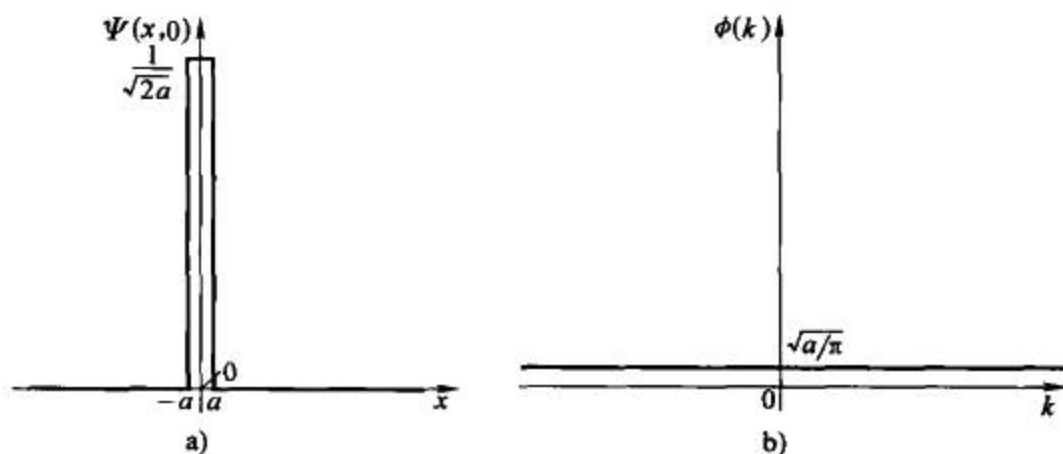


图 2.9 例题 2.6 中， a 较小情况下
a) $\Psi(x, 0)$ 的图形 b) $\phi(k)$ 的图形

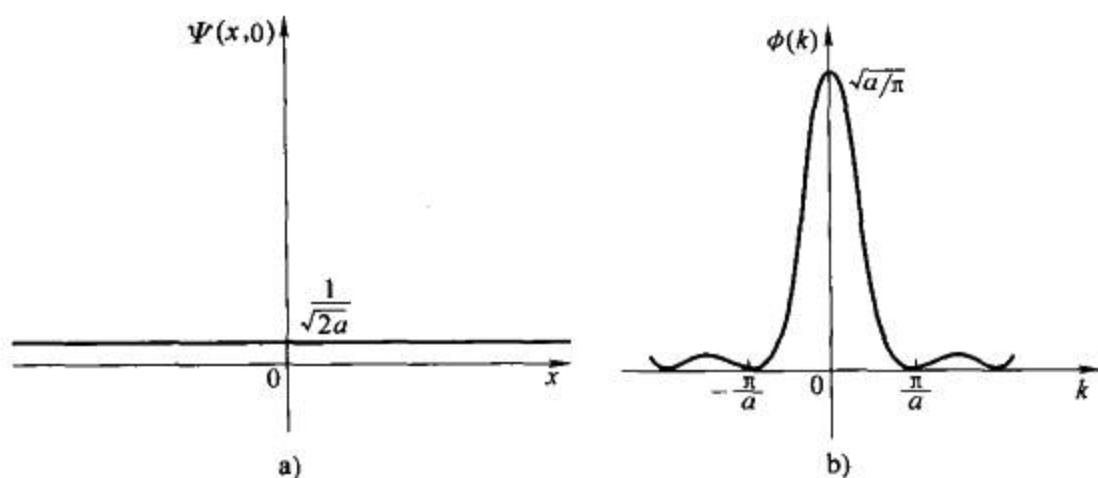


图 2.10 例题 2.6 中, a 较大情况下
a) $\Psi(x,0)$ 的图形 b) $\phi(k)$ 的图形

但是坐标不再能够确定。

现在我们回到前面提到的佯谬问题上来：式 2.94 表示一个粒子的分离变量解 $\Psi_k(x, t)$ 以一个“错误”的速度传播。严格来讲，这样的问题是不存在的，因为我们发现 Ψ_k 不代表一个物理上可实现的态。不过，探讨自由粒子的波函数（式 2.100）包含有速度的什么信息是令人感兴趣的。基本的思想是：一个波包是正弦函数的叠加，其振幅由 $\phi(k)$ 来调制（图 2.11）；在一个“包络线”内含有“波纹”。对应粒子速度的不是一个个别波纹的速度（所谓的相速度），而是包络线的速度（群速度）——这个速度，取决于波包的本质，可以比组成波包的波纹的速度大或者小。对于一个正弦波，群速度等于相速度。对水波，当你向水塘扔进一块石头，也许你曾注意到，群速度是相速度的一半（如果你注意一个个别波纹，你会发现它在后部生成，向前运动越过群体，在前面衰减，而群体则以个别波纹的一半速度传播）。我现在要证明的是，在量子力学中自由粒子波函数的群速度是相速度的两倍——正好代表经典粒子的速度。

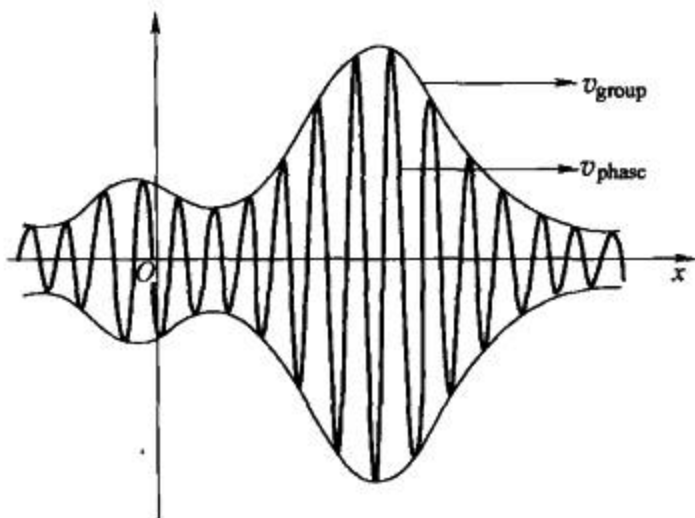


图 2.11 一个波包。“包络线”以群速度传播；“波纹”以相速度传播

现在的问题是确定具有一般形式的波包

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \omega t)} dk$$

的群速度。（对我们的情况 $\omega = (\hbar k^2/2m)$ ），但是我现在讲的是对所有种类的波包都适用，无论它的色散关系—— ω 对 k 的依赖关系——如何。）让我们假定 $\phi(k)$ 是在某个 k_0 处的一个狭窄分布。（一个宽的分布也是允许的，但是这样的波包波形变化很快——因为不同的组分有不同的速度——所以具有一个很好定义的速度的“群”的整体概念就会失去意义。）既然除了 k_0 附近外积分可以被忽略，我们可以在这一点对 $\omega(k)$ 做泰勒展开，并仅保留到一次项：

$$\omega(k) \cong \omega_0 + \omega'_0(k - k_0),$$

式中 ω'_0 是 ω 对 k 的导数在 k_0 的值的大小。

从 k 到 $s \equiv k - k_0$ 做变量变换 (使积分区间的中心在 k_0)，我们有

$$\Psi(x, t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i[(k_0 + s)x - (\omega_0 + \omega'_0)t]} ds.$$

在 $t=0$ 时，

$$\Psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i(k_0 + s)x} ds,$$

在以后时刻

$$\Psi(x, t) \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(-\omega_0 t + k_0 \omega'_0 t)} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k_0 + s) e^{i(k_0 + s)(x - \omega'_0 t)} ds.$$

除了 x 变换到 $(x - \omega'_0 t)$ 外，这个积分同 $\Psi(x, 0)$ 的积分是一样的。所以

$$\Psi(x, t) \cong e^{i(-\omega_0 + k_0 \omega'_0)t} \Psi(x - \omega'_0 t, 0). \quad (2.105)$$

除了前面的一个相因子 (它在任何方面都不影响 $|\Psi|^2$) 外，这个波包显然以速度 ω'_0 运动：

$$v_{\text{group}} = \frac{d\omega}{dk} \quad (2.106)$$

(在 $k = k_0$ 取值)。这和普通的相速度

$$v_{\text{phase}} = \frac{\omega}{k} \quad (2.107)$$

是不一样的。在我们的情况中， $\omega = (\hbar k^2/2m)$ ，所以 $\omega/k = (\hbar k/2m)$ ，而 $d\omega/dk = (\hbar k/m)$ ，正好是相速度的 2 倍。这证实了与经典粒子速度相匹配的是波包的群速度而不是定态的相速度：

$$v_{\text{classical}} = v_{\text{group}} = 2v_{\text{phase}} \quad (2.108)$$

习题 2.18 证明 $[Ae^{ikx} + Be^{-ikx}]$ 和 $[C\cos kx + D\sin kx]$ 是 x 相同函数的等价方式，用 A 和 B 表示 C 和 D ，及用 C 和 D 表示 A 和 B 。注：在量子力学中，当 $V=0$ 时，指数形式代表一个行波，在讨论自由粒子时最为方便，而正弦和余弦对应于驻波，它们在无限深方势阱问题中自然出现。

习题 2.19 求出自由粒子波函数式 2.94 的概率流 J (习题 1.14)，概率流朝哪个方向流动？

****习题 2.20** 本题的目的是引导你熟悉普朗克尔定理的证明，从在一个有限区间的普通傅里叶级数理论出发扩展到无限区间。

(a) 普朗克尔定理说“任何”在区间 $[-a, a]$ 的函数 $f(x)$ 可以展开为傅里叶级数：

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n \sin(n\pi x/a) + b_n \cos(n\pi x/a)].$$

证明这可以等价写为

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{in\pi x/a}.$$

以 a_n 和 b_n 如何表示 c_n ？

(b) 证明 (由傅里叶技巧的适当改变)

和 $\phi = \pi$ 的具体情况。(这个问题的一个图示可在脚标 7 给出的网页找到。)

***习题 2.7** 一个处在一维无限深方势阱中的粒子，其初始波函数是¹⁵

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} Ax, & 0 \leq x \leq a/2, \\ A(a-x), & a/2 \leq x \leq a. \end{cases}$$

- 画出 $\Psi(x, 0)$ 的图形然后求出 A 。
- 求出 $\Psi(x, t)$ 。
- 测量能量得到结果为 E_1 的概率是多少？
- 求出能量的期望值。

习题 2.8 一个质量为 m 的粒子，处在一维无限深方势阱（宽度为 a ）中，从势阱的左半边开始运动，并且在这个区域中（ $t=0$ 时）的每一点找到粒子的概率相同。

- 求出初始波函数 $\Psi(x, 0)$ ？（假设它为实数，并且不要忘记归一化。）
- 测量能量得到值为 $\pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$ 的概率是多少？

习题 2.9 对例题 2.2 中的波函数，用公式：

$$\langle H \rangle = \int \Psi(x, 0)^* \hat{H} \Psi(x, 0) dx,$$

求 $t=0$ 时 H 的期待值。同用式 2.39 求出例题 2.3 的结果比较。注意：因为 $\langle H \rangle$ 不依赖时间，所以用 $t=0$ 也不失普遍性。

2.3 谐振子

经典谐振子的模型是一个质量为 m 物体挂在一个劲度系数为 k 的弹簧上。其运动由胡克（Hooke）定律决定，

$$F = -kx = m \frac{d^2 x}{dt^2}$$

（忽略摩擦力），它的解是

$$x(t) = A \sin(\omega t) + B \cos(\omega t),$$

其中

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (2.41)$$

是谐振子的角频率。势能为

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2; \quad (2.42)$$

其图形是抛物线状的。

当然，没有完全理想的谐振子，如

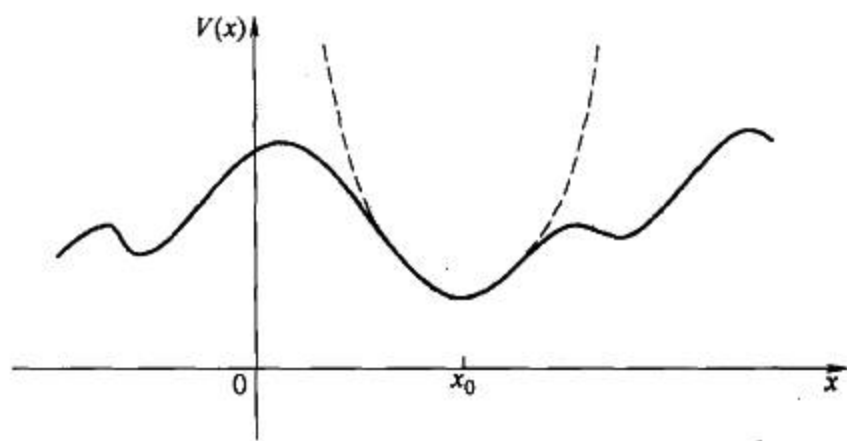


图 2.4 对任意势能极小值点附近的抛物线形近似（虚线）

¹⁵ 原则上对初始波函数的形状没有限制，只要它是归一化的。特别是， $\Psi(x, 0)$ 不必有一个连续的导数——事实上它甚至不必是一个连续函数。不过，在这种情况下，如果你试图用 $\int \Psi(x, t)^* \hat{H} \Psi(x, t) dx$ 计算 $\langle H \rangle$ ，会遇到技术上的困难，因为 $\Psi(x, 0)$ 的二次导数不能很好定义。对习题 2.9 没有问题，因为不连续发生在端点处，其波函数在此为零。在习题 2.48 中你将看到如何处理类似习题 2.7 的情况。

果弹簧伸长得太多, 就会被破坏, 而且在远未达到破坏点之前胡克定律就已经失效。但是在实际中, 任何势能在其极小值附近都可以用抛物线近似 (图 2.4)。形式上, 如果我们将 $V(x)$ 在极小值附近用泰勒级数展开:

$$V(x) = V(x_0) + V'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \cdots,$$

减去 $V(x_0)$ (可以给 $V(x)$ 加上一个常数, 因为这不改变力), 由于 $V'(x_0) = 0$ (因为 x_0 是极小值) 忽略高次项 (只要 $(x - x_0)$ 很小就可以忽略), 得到

$$V(x) \cong \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2,$$

这正是描述谐振子的势 (对于 x_0 点), 其有效劲度系数是 $k = V''(x_0)^{16}$ 。事实上, 任何振动, 只要振幅足够小, 都可以近似看做简谐振动, 这就是谐振子为什么如此重要的原因。

量子力学的问题是要解势能为

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.43)$$

时的薛定谔方程。(按照惯例, 由式 2.41, 用经典频率代替劲度系数)。如我们所知, 只需解定态薛定谔方程就足够了:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi. \quad (2.44)$$

对此问题在文献中你会发现两种完全不同的处理方法。第一种是用幂级数法直接去解微分方程; 它的优点是在解其他很多势方程时都能够适用 (事实上, 我们将在第 4 章中用它去解库仑势)。第二种是一种巧妙的代数方法, 使用所谓的升降阶算符。我们首先要讲的是代数方法, 因为它比较快而且简单 (而且很有趣)¹⁷; 如果你现在想要跳到幂级数法也是可行的, 但你应该计划在将来某个阶段去学习它。

2.3.1 代数法

现在, 让我们以更具启发性的形式重写式 2.44:

$$\frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2]\psi = E\psi, \quad (2.45)$$

其中 $p \equiv (\hbar i) d/dx$ 是动量算符。求解的基本思想是分解哈密顿算符,

$$H = \frac{1}{2m}[p^2 + (m\omega x)^2]. \quad (2.46)$$

如果这些只是数字, 那比较容易了:

$$u^2 + v^2 = (iu + v)(-iu + v)$$

但是现在的情况没那么简单, 因为 p 和 x 是算符, 而算符的次序一般来说是不能彼此交换的 (xp 和 px 是不一样的)。这促使我们检验下列量

$$a_{\pm} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp ip + m\omega x) \quad (2.47)$$

¹⁶ 注意, 既然假定 x_0 是极小点, 所以 $V''(x_0) \geq 0$ 。仅有 $V''(x_0) = 0$ 的极少情况下振动不能平滑被简谐振动近似。

¹⁷ 我们将在角动量理论中遇到同样的方法 (第 4 章), 这种技术在超对称量子力学中可推广到一类广泛的势 (见, 例如, Richard W. Robinett, Quantum Mechanics, Oxford U. P., New York, 1997), 14.4 节。

(前面因子是为了使最后的结果看起来更优美)。

那么, 乘积 $a_- a_+$ 是什么呢?

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

正如预期, 有一个额外项, 其涉及 $(xp - px)$ 。我们称它为 x 与 p 的对易式; 这是衡量它们是否能够交换的量度。一般有, 算符 A 和 B 的对易式 (用一个方括号表示) 是:

$$[A, B] = AB - BA. \quad (2.48)$$

用这种符号来表示, 则:

$$a_- a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega} [p^2 + (m\omega x)^2] - \frac{i}{2\hbar} [x, p]. \quad (2.49)$$

我们需要求出 x 和 p 的对易式。请注意: 当用这种抽象的表示运算时, 算符需非常小心对待, 除非把它作用在一个测试函数 $f(x)$, 要不然极易产生错误。最后, 你可以把测试函数去掉, 只剩下关于算符的方程。对目前的例子, 我们有:

$$[x, p]f(x) = \left[x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}(f) - \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}(xf) \right] = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{df}{dx} - x \frac{df}{dx} - f \right) = i\hbar f(x). \quad (2.50)$$

为了得出所要结果, 我们去掉测试函数, 则:

$$\boxed{[x, p] = i\hbar.} \quad (2.51)$$

这个有趣而又普遍存在的结果就是所谓的正则对易关系¹⁸。

利用上面式子, 式 2.49 可写为

$$a_- a_+ = \frac{1}{\hbar\omega} H + \frac{1}{2}, \quad (2.52)$$

或

$$H = \hbar\omega \left(a_- a_+ - \frac{1}{2} \right). \quad (2.53)$$

显然哈密顿的分解还不够完美——在右边还有一个额外的 $-1/2$ 。注意 a_+ 和 a_- 的次序非常重要, 如果 a_+ 在左边, 则有

$$a_+ a_- = \frac{1}{\hbar\omega} H - \frac{1}{2}. \quad (2.54)$$

特别有

$$[a_-, a_+] = 1. \quad (2.55)$$

所以哈密顿量还可以等价地写成:

$$H = \hbar\omega \left(a_+ a_- + \frac{1}{2} \right). \quad (2.56)$$

利用 a_{\pm} , 谐振子的薛定谔方程¹⁹可写为如下形式:

¹⁸ 在更深的意义上, 量子力学的所有神奇都可以追述到坐标和动量的不对易这个事实。确实也有作者把正则对易关系作为量子理论的公理, 并用它导出 $p = (\hbar/i) d/dx$ 。

¹⁹ 我对总写“定态薛定谔方程”感到疲倦, 所以当课文的内容是清晰不会引起混淆时, 我仅用“薛定谔方程”。

$$\hbar\omega\left(a_{\pm}a_{\mp} \pm \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi. \quad (2.57)$$

现在的关键问题是：我们断言，如果 ψ 能够满足能量为 E 的薛定谔方程（即 $H\psi = E\psi$ ），则 $a_+\psi$ 满足能量为 $(E + \hbar\omega)$ 的薛定谔方程： $H(a_+\psi) = (E + \hbar\omega)(a_+\psi)$ 。

证明：

$$\begin{aligned} H(a_+\psi) &= \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)(a_+\psi) = \hbar\omega\left(a_+a_-a_+ + \frac{1}{2}a_+\right)\psi \\ &= \hbar\omega a_+\left(a_-a_+ + \frac{1}{2}\right)\psi = a_+\left[\hbar\omega\left(a_+a_- + 1 + \frac{1}{2}\right)\psi\right] \\ &= a_+(H + \hbar\omega)\psi = a_+(E + \hbar\omega)\psi = (E + \hbar\omega)(a_+\psi). \end{aligned}$$

（上式第二行中我利用式 2.55 用 $a_+a_- + 1$ 替换了 a_-a_+ 。注意虽然 a_+ 与 a_- 的次序很重要， a_{\pm} 与任何常数的次序——比如 \hbar , ω , E 等却没关系；一个算符和任何常数都是对易的。）

同样可证， $a_-\psi$ 是能量为 $(E - \hbar\omega)$ 的解：

$$\begin{aligned} H(a_-\psi) &= \hbar\omega\left(a_-a_+ - \frac{1}{2}\right)(a_-\psi) = \hbar\omega a_-\left(a_+a_- - \frac{1}{2}\right)\psi \\ &= a_-\left[\hbar\omega\left(a_-a_+ - 1 - \frac{1}{2}\right)\psi\right] = a_-(H - \hbar\omega)\psi = a_-(E - \hbar\omega)\psi \\ &= (E - \hbar\omega)(a_-\psi). \end{aligned}$$

所以，这是一种生成新解的极好方法，如果我们得到了一个解，通过升降能量就可以得到其他的解。我们把 a_{\pm} 叫做升降阶算符，因为它们能使我们升降能级； a_+ 是升阶算符， a_- 是降阶算符。图 2.5 说明了这样的能态“梯子”。

但是请考虑一下，如果我们反复应用降阶算符，那又会怎样呢？最终，我们会得到一个低于零的能量状态，而（根据习题 2.2 中的一般定理）这根本是不存在的！所以在某个地方这个机制必定是失效的。为什么会出现这种情况？我们知道 $a_-\psi$ 是薛定谔方程的一个新解，但这并不能保证它是归一化的——它可能是零或者它的平方积分可能是无限大的。事实上它是前者：有一个最低的阶梯（称为 ψ_0 ）使得

$$a_-\psi_0 = 0. \quad (2.58)$$

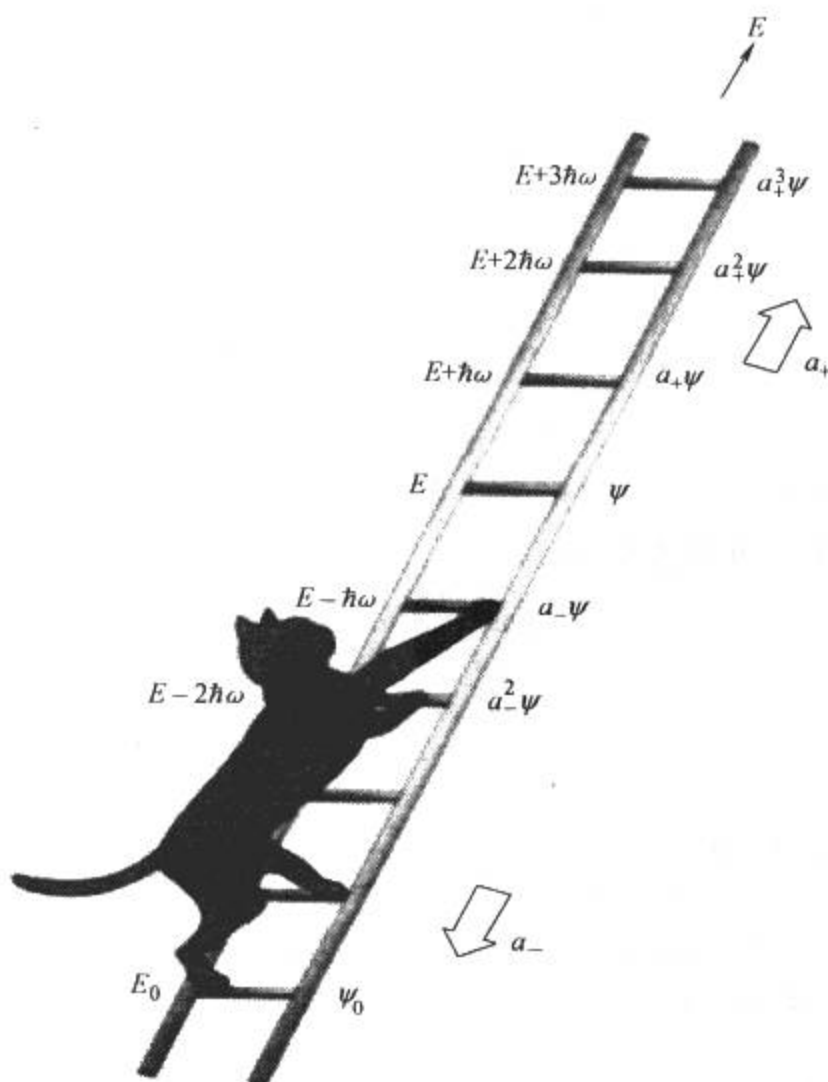


图 2.5 谐振子的能态“梯子”

我们可以利用这个确定 $\psi_0(x)$:

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

或

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

这个微分方程很容易解:

$$\int \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar} \int x dx \Rightarrow \ln \psi_0 = -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 + \text{常数},$$

所以

$$\psi_0(x) = A e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}.$$

我们现在对它进行归一化:

$$1 = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-m\omega x^2/\hbar} dx = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}},$$

所以 $A^2 = \sqrt{m\omega/\pi\hbar}$, 因此

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \quad (2.59)$$

我们把它代入薛定谔方程以确定相应的能量 (以式 2.57 的形式), $\hbar\omega (a_+ a_- + 1/2) \psi_0 = E_0 \psi_0$, 利用 $a_- \psi_0 = 0$, 有:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega \quad (2.60)$$

现在我们安全地站在梯子的最底部 (量子谐振子的基态), 从而我们可以反复应用升阶算符生成激发态,²⁰ 每升一步增加能量 $\hbar\omega$:

$$\psi_n(x) = A_n (a_+)^n \psi_0(x), \text{ 和 } E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad (2.61)$$

这里 A_n 是归一化常数。通过将升阶算符 (反复) 作用于 ψ_0 , 我们原则上能够得出谐振子所有的²¹ 定态。同时, 不用另外计算, 就可以确定所允许的能量。

例题 2.4 求出谐振子的第一激发态。

解: 利用式 2.61

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 a_+ \psi_0 = \frac{A_1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2} \\ &= A_1 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}. \end{aligned} \quad (2.62)$$

我们可以直接用“手算”对它进行归一化:

²⁰ 与以往不同, 由于某些理由, 我们对谐振子问题习惯上从 0 开始标记态, 而不是从 1 开始。显然, 式 2.17 求和的下限也要相应改变。

²¹ 注意由这种方法我们可以得到所有的归一化解。如果还有另外的某些解, 我们可以由第二个阶梯通过反复应用升降算符生成它们。但是这个新的梯子的最低阶应当满足式 2.58, 这必定导致式 2.59 的解, 新的梯子的最低阶与原来是一样的, 所以两个梯子 is 等同的。

$$\int |\psi_1|^2 dx = |A_1|^2 \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar} x^2} dx = |A_1|^2,$$

恰好, $A_1 = 1$ 。

我们不想用这种方法去计算 ψ_{50} (那需要应用升阶算符 50 次!), 但不必介意: 原则上式 2.61 可以做到——除了归一化常数外。

请注意, 你甚至可以用代数的方法得到归一化常数, 不过需要一些精巧的步骤。我们知道 $a_{\pm}\psi_n$ 是正比于 $\psi_{n\pm 1}$ 的。

$$a_+\psi_n = c_n\psi_{n+1}, \quad a_-\psi_n = d_n\psi_{n-1} \quad (2.63)$$

但是比例因子 c_n 和 d_n 是什么? 首先注意到对于“任何”²² 函数 $f(x)$ 和 $g(x)$,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(a_{\pm}g) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (a_{\mp}f)^* g dx. \quad (2.64)$$

(用线性代数的语言, a_{\mp} 是 a_{\pm} 的厄密共轭。)

证明:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(a_{\pm}g) dx = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} f^* \left(\mp \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) g dx,$$

分步积分使 $\int f^* (dg/dx) dx$ 转变为 $-\int (df/dx)^* g dx$ (由脚标 22 所述原因, 边界项为零), 所以:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(a_{\pm}g) dx = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\pm \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x \right) f \right]^* g dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (a_{\mp}f)^* g dx.$$

证毕。

特别有:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (a_{\pm}\psi_n)^* (a_{\pm}\psi_n) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (a_{\mp}a_{\pm}\psi_n)^* \psi_n dx.$$

但是 (由式 2.57 和式 2.61):

$$a_+a_-\psi_n = n\psi_n, \quad a_-a_+\psi_n = (n+1)\psi_n, \quad (2.65)$$

所以:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (a_+\psi_n)^* (a_+\psi_n) dx = |c_n|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{n+1}|^2 dx = (n+1) \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n|^2 dx,$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} (a_-\psi_n)^* (a_-\psi_n) dx = |d_n|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{n-1}|^2 dx = n \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n|^2 dx.$$

但是由于 ψ_n 和 $\psi_{n\pm 1}$ 已是归一化的, 可知 $|c_n|^2 = n+1$, $|d_n|^2 = n$, 因此:

$$a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}, \quad a_-\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1}. \quad (2.66)$$

这样

$$\psi_1 = a_+\psi_0, \quad \psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}a_+\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_+)^2\psi_0,$$

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}a_+\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3 \times 2}}(a_+)^3\psi_0, \quad \psi_4 = \frac{1}{\sqrt{4}}a_+\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{4 \times 3 \times 2}}(a_+)^4\psi_0,$$

²² 当然, 它的积分必须存在, 这意味着在 $\pm\infty$ 处 $f(x)$ 和 $g(x)$ 必须趋于零。

依次类推。显然有

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a_+)^n \psi_0, \quad (2.67)$$

也就是说式 2.61 中的归一化因子是: $A_n = 1/\sqrt{n!}$ (特别有, $A_1 = 1$, 和例题 2.4 的结果一致)。

同无限深方势阱情况一样, 谐振子的定态是相互正交的:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \delta_{mn}. \quad (2.68)$$

利用式 2.65 及式 2.64 两次——首先移动 a_+ , 然后再移动 a_- , 就可以证明上述公式:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* (a_+ a_-) \psi_n dx &= n \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \psi_n dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} (a_- \psi_m)^* (a_- \psi_n) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} (a_+ a_- \psi_m)^* \psi_n dx \\ &= m \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \psi_n dx. \end{aligned}$$

除非 $m = n$, 否则 $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \psi_n dx$ 必须为零。而正交性意味着, 当我们将 $\Psi(x, 0)$ 按定态展开时 (式 2.16), 我们同样可以用傅里叶技巧 (式 2.34) 去确定展开系数, $|c_n|^2$ 同样是测量能量得到 E_n 的概率。

例题 2.5 求出谐振子第 n 态势能的期待值。

解:

$$\langle V \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\rangle = \frac{1}{2} m \omega^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* x^2 \psi_n dx.$$

计算这类积分有非常简洁的方法 (有关 x 和 p 的幂次的): 根据定义 (式 2.47) 利用升降阶算符来表示 x 和 p :

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a_+ + a_-); \quad p = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} (a_+ - a_-). \quad (2.69)$$

在目前这个例子中, 我们对 x^2 感兴趣:

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} [(a_+)^2 + (a_+ a_-) + (a_- a_+) + (a_-)^2].$$

所以

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar \omega}{4} \int \psi_n^* [(a_+)^2 + (a_+ a_-) + (a_- a_+) + (a_-)^2] \psi_n dx.$$

但是 $(a_+)^2 \psi_n$ (除了归一化常数外) 等于 ψ_{n+2} , 它和 ψ_n 是正交的, 同样 $(a_-)^2 \psi_n$ 正比于 ψ_{n-2} 是。所以这些项被去除, 我们可以利用式 2.65 计算余下的两项:

$$\langle V \rangle = \frac{\hbar \omega}{4} (n + n + 1) = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

可以看出, 势能的期待值正好是总能量的一半 (另一半当然是动能), 这是线性谐振子

的一个特征，后面我们还会讨论到这一点。

*习题 2.10

(a) 构造出 $\psi_2(x)$ 。

(b) 画出 ψ_0 , ψ_1 和 ψ_2 。

(c) 通过直接积分，检验 ψ_0 , ψ_1 和 ψ_2 的正交性。提示：如果你利用函数的奇偶性，仅需做一个积分。

*习题 2.11

(a) 通过直接积分计算 ψ_0 态（式 2.59）和 ψ_1 态（式 2.62）的 $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ 及 $\langle p^2 \rangle$ 。注：在涉及谐振子的问题中，如果你引入变量 $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar}x$ 和常数 $\alpha = (m\omega/\pi\hbar)^{1/4}$ ，可以简化问题。

(b) 对这些态验证不确定原理。

(c) 计算这些态的 $\langle T \rangle$ （平均动能）和 $\langle V \rangle$ （平均势能）。（无需再积分）你预期它们的和会是什么？

***习题 2.12** 利用例题 2.5 中的方法，计算谐振子第 n 态的 $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ 及 $\langle T \rangle$ 。验证它们满足不确定原理。

习题 2.13 一个处于谐振子势的粒子的初始态为：

$$\Psi(x, 0) = A[3\psi_0(x) + 4\psi_1(x)].$$

(a) 求出 A 。

(b) 给出 $\Psi(x, t)$ 和 $|\Psi(x, t)|^2$ 。

(c) 计算 $\langle x \rangle$ 和 $\langle p \rangle$ 。如果它们是在以经典的频率振荡，也不要太兴奋；如果用 $\psi_2(x)$ 代替 $\psi_1(x)$ ，结果会怎样？验证恩费斯脱定理（式 1.38）对此波函数成立。

(d) 如果测量这个粒子的能量，有哪些可能的值？各自出现的概率是多少？

习题 2.14 一个粒子处在经典频率为 ω 的基态，若突然改变其频率： $\omega' = 2\omega$ ，而不改变原本的波函数（当然，由于哈密顿的改变，波函数的演化要发生变化）。测量能量得到 $\hbar\omega/2$ 的概率是多少？得到 $\hbar\omega$ 的概率又是多少？答案：0.943。

2.3.2 解析法

我们现在重新回到谐振子的薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi, \quad (2.70)$$

并用级数的方法直接去求解。如果我们引入一个无量纲的变量，公式会变得更加清晰

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x; \quad (2.71)$$

用 ξ ，薛定谔方程可以写为

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - K)\psi, \quad (2.72)$$

式中 K 是以 $(1/2)\hbar\omega$ 为单位的能量：