量子力学与统计物理

Quantum mechanics and statistical physics

光电科学与工程学院 王智勇

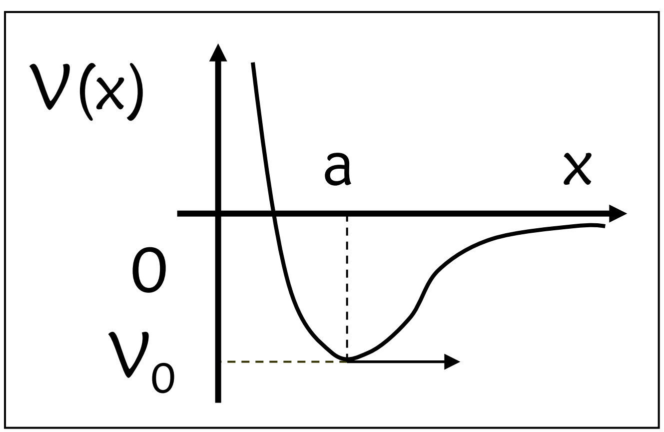
第五章：求解定态薛定谔方程

第二讲：谐振子

为什么研究一维谐振子？

自然界广泛存在简谐振动，任何体系在平衡位置附近的微小振动，例如分子振动、晶格振动、原子核表面振动以及辐射场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各种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是很重要的。

例如双原子分子，两原子间的势V是二者相对距离x的函数，如图所示。在 $x=a$ 附近势函数可以泰勒展开：



$$V(x)=V(a)+\frac{1}{1!}\left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{x=a}(x-a)+\frac{1}{2!}\left.\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\right|_{x=a}(x-a)^2+\cdots$$

$$V(a)=V_0 \qquad \left.\frac{\partial V}{\partial x}\right|_{x=a}=0$$

振动幅度不大时，展开式中的高阶项可以略去。

$$V(x) \approx V_0 + \frac{1}{2!}\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\bigg|_{x=a}(x-a)^2$$

$$= V_0 + \frac{1}{2}k(x-a)^2$$

取坐标原点为(a, V_0)，则势可表示为标准谐振子势的形式：

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2, \qquad \Rightarrow F = -\frac{\partial V}{\partial x} = -kx$$

可见，一些复杂势场下粒子的运动往往可以用弹簧振子（一维谐振子）来近似描述。

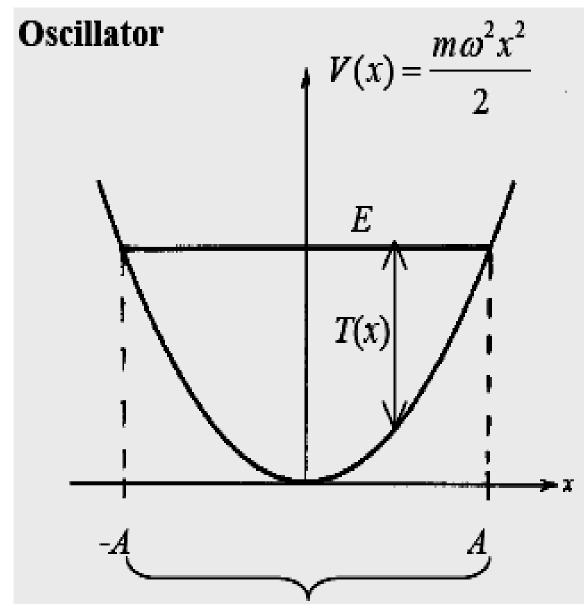
经典谐振子

在经典力学中，当质量为μ的粒子，受弹性力$F=-k\,x$作用，由牛顿第二定律可以写出运动方程为：

$$\mu\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}=-kx\rightarrow x''+\omega^2x=0,\ (\omega=\sqrt{k/\mu})$$

其解为$x=A\sin(\omega t+\delta)$. 这种运动称为简谐振动，做这种运动的粒子称为谐振子。

- 谐振子哈密顿量：$H=\frac{p_x^{\ 2}}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$
- 谐振子能量：$E=\frac{1}{2}\mu\omega^2A^2$

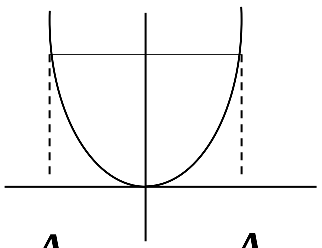


经典允许的振动范围

能量守恒。随振幅变化呈现连续函数形式。(在右图中，谐振子质量用m表示，振幅用A表示)

半经典谐振子

能量为E的粒子在谐振势中的活动范围为



$$p = \sqrt{2\mu[E - V(x)]}$$

$$E = V(x)\big|_{x=A} = \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2\big|_{x=A} \Rightarrow A = \sqrt{2E/\mu\omega^2}$$

量子化条件：$\oint p\mathrm{d}x = nh$

$$= 2\int_{-A}^{+A}\sqrt{2\mu(E - \mu\omega^2 x^2/2)}\mathrm{d}x$$

$$= 2\mu\omega\int_{-A}^{+A}\sqrt{A^2 - x^2}\mathrm{d}x$$

$$= 2\mu\omega A^2\pi/2 = \mu\omega\pi A^2$$

$$\Rightarrow A^2 = nh/\mu\omega\pi,\ n = 0,1,2\ldots,$$

$$A^2 = \frac{nh}{\mu\omega\pi} = \frac{2n\hbar}{\mu\omega}, \quad A = \sqrt{\frac{2E}{\mu\omega^2}}$$

$$\Rightarrow \frac{2\hbar n}{\mu\omega} = \frac{2E}{\mu\omega^2} \Rightarrow E = n\hbar\omega, \ n = 0, 1, 2 \ldots,$$

$$E_n = n\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, 3, \cdots$$

$$\Delta E = \hbar\omega$$

谐振子能量量子化，基态能量为 $E_0 = 0\hbar\omega = 0$

能级间的能差是定值 $\Delta E = \hbar\omega$。

量子谐振子

量子力学中的线性谐振子是指在势场 $V(x)=\mu\omega^2x^2/2$ 中运动的质量为 μ 的粒子

哈密顿算符 $$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2$$

（一）定态Schrödinger方程：

$$[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2]\psi(x)=E\psi(x) \qquad (1)$$

改写成

$$\frac{1}{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\frac{d^2\psi}{dx^2}+(\frac{2E}{\hbar\omega}-\frac{\mu\omega}{\hbar}x^2)\psi(x)=0 \qquad (2)$$

令

$$\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega} \qquad \alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}, \quad \xi=\alpha x \qquad (3)$$

于是方程（1）可写成 $$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2}+(\lambda-\xi^2)\psi=0 \qquad (4)$$

（二）　方程的求解

当 $|\xi|\to\infty$ 时，方程（4）的渐近形式为

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2}=\xi^2\psi \qquad (5)$$

方程（5）在 $|\xi|\to\infty$ 处的有限解为 $\psi(\xi)\sim ce^{-\xi^2/2}$

$$\therefore \quad \psi(\xi)=H(\xi)e^{-\xi^2/2} \qquad (6)$$

把 $\psi(\xi)$ 代入方程（4）可得 $H(\xi)$ 满足的微分方程

$$\frac{\mathrm{d}^2 H(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} - 2\xi \frac{\mathrm{d}H(\xi)}{\mathrm{d}\xi} + (\lambda - 1)H(\xi) = 0, \quad (7)$$

级数法求解：

对 $H(\xi)$ 作级数展开： $H(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n$

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}\xi} = a_1 + 2a_2\xi + 3a_3\xi^2 + \cdots = \sum_{n=1}^{\infty} n a_n \xi^{n-1}$$

$$\xi \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}\xi} = a_1\xi + 2a_2\xi^2 + 3a_3\xi^3 + \cdots = \sum_{n=0}^{\infty} n a_n \xi^n$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 H}{\mathrm{d}\xi^2} = 1\cdot 2a_2 + 2\cdot 3a_3\xi + 3\cdot 4a_4\xi^2 \cdots = \sum_{n=2}^{\infty} n(n-1) a_n \xi^{n-2}$$

$$\frac{\mathrm{d}^2 H}{\mathrm{d}\xi^2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} \xi^n$$

代回(7)，得：

$$\sum_{n=0} a_{n+2}(n+1)(n+2)\xi^n - 2\sum_{n=0} a_n n\xi^n + (\lambda-1)\sum_{n=0} a_n \xi^n = 0$$

由上式可以推得展开系数间有如下关系

$$a_{n+2} = \frac{2n-\lambda+1}{(n+1)(n+2)} a_n, \qquad (8)$$

$$\psi(\xi)=H(\xi)\exp(-\xi^2/2)\text{在}\xi\to\infty\text{时应有限}$$

利用(8)式分析试探解可知

$$H(\xi)=\sum_{n=0}^{+\infty}a_n\xi^n=\begin{cases}H_1(\xi)=a_0+a_2\xi^2+a_4\xi^4+\ldots\\ H_2(\xi)=a_1\xi+a_3\xi^3+a_5\xi^5+\ldots\end{cases}$$

$$\Rightarrow H_1(\xi)\sim\exp(\xi^2),\ H_1(\xi)\sim\xi\exp(\xi^2)$$

因此为了保证$\psi(\xi)$在$\xi\longrightarrow+\infty$时有限，试探解不能是无限多项求和，只能是有限项求和

结论：试探解级数应在某处“中止”,设其最高阶为n,

$$a_n\neq 0,\ a_{n+2}=\frac{2n-\lambda+1}{(n+1)(n+2)}a_n=0$$

$$\Rightarrow\quad \boxed{\begin{array}{l}2n=\lambda-1,\ \ (n=0,1,2,\ldots),\ \ (9)\\ \lambda=2E/\hbar\omega\Rightarrow E_n=(n+1/2)\hbar\omega\end{array}}$$

把 $2n=\lambda-1$ 代回方程（7），得：

$$\frac{\mathrm{d}^2 H_n}{\mathrm{d}\xi^2}-2\xi\frac{\mathrm{d}H_n}{\mathrm{d}\xi}+2nH_n=0$$

这是厄密方程，其解为厄密多项式。

$$H_n(\xi)=(-1)^n\exp(\xi^2)\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\exp(-\xi^2)\Rightarrow\begin{cases}H_0=1,\\ H_1=2\xi,\\ H_2=4\xi^2-2,\\ H_3=8\xi^3-12\xi,\\ H_4=16\xi^4-48\xi^2+12,\end{cases}$$

原方程得解：

$$\boxed{\psi_n(\xi)=N_n e^{-\xi^2/2}H_n(\xi)}$$

归一化常数

$$\psi_n(\xi) = N_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$$

要对它归一化，我们先要了解厄密多项式的一些性质：

1.递推关系：
$$\xi H_n(\xi) = \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) + n H_{n-1}(\xi)$$

2.微分性质：
$$\frac{\mathrm{d}H_n}{\mathrm{d}\xi} = 2n H_{n-1}(\xi)$$

3.完备性：
$$f(\xi) = \sum_0^{\infty} c_n H_n(\xi)$$

式中的展开系数为：

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{\pi}\, 2^n n!} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\xi^2) f(\xi) H_n(\xi) \mathrm{d}\xi$$

4.正交归一性：

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_{n'}(\xi) \mathrm{d}\xi = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nn'} \qquad \xi = ax$$

$$\Rightarrow N_n = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right)^{1/2}$$

（三） 正交归一的本征函数

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right) H_n(\alpha x) \qquad \alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

定态波函数 $\Psi_n(x,t)=\psi_n(x)\exp(-\mathrm{i}E_n t/\hbar)$

$$=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t\right)H_n(\alpha x),\quad (10)$$

（四）本征能量

$$\lambda=\frac{2E}{\omega\hbar},\ \leftarrow 2n=\lambda-1,\ (n=0,1,2,\ldots),\quad (9)$$

得本征能量：

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\ (n=0,1,2,3,\cdots),\ (11)$$

谐振子经典振幅：$A_n=\sqrt{\dfrac{2E_n}{\mu\omega^2}}=\sqrt{\dfrac{(2n+1)\hbar}{\mu\omega}}=\dfrac{\sqrt{2n+1}}{\alpha}$, $\alpha=\sqrt{\dfrac{\mu\omega}{\hbar}}$

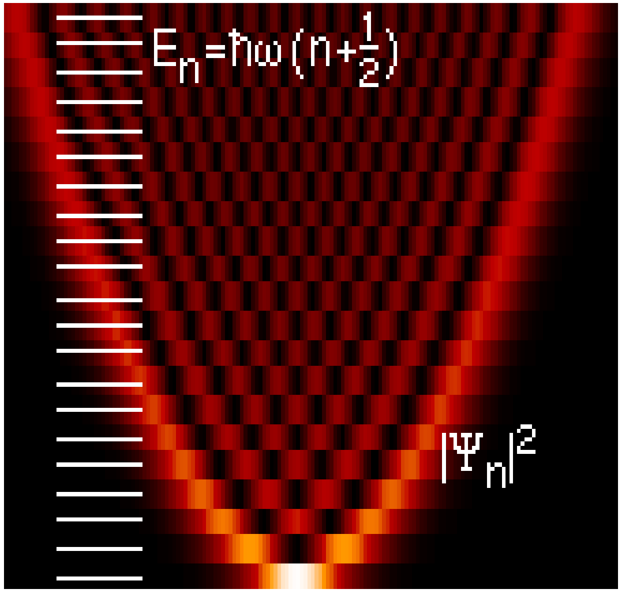
（五）讨论

1. 能量的本征值： $$E_n = (n+\frac{1}{2})\hbar\omega$$

（1）能量谱为分离谱，两能级的间隔为

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$$

(与普朗克黑体辐射中的假设相同)



（2）一个谐振子能级只有一个本征函数，所以是非简并的

（3）基态能量 （又称零点能）与基态波函数

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega,\ \psi_0(x) = (\frac{\mu\omega}{\pi\hbar})^{1/4}\exp(-\frac{\mu\omega}{2\hbar}x^2)$$

实验事实： 光被晶体散射实验证明：在趋于绝对零度时，散射光的强度趋于一确定值，说明零点振动能的存在；常压下，温度趋于零度，液态氦也不会变成固体，说明有零点能

证明： 零点能源于不确定性原理

振子能量

$$E=\overline{H}=\frac{\overline{p^2}}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\overline{x^2}$$

$$\begin{cases}\overline{(\Delta x)^2}=\overline{x^2}-\overline{x}^2\\ \overline{(\Delta p)^2}=\overline{p^2}-\overline{p}^2\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}\overline{x^2}=\overline{(\Delta x)^2}+\overline{x}^2\\ \overline{p^2}=\overline{(\Delta p)^2}+\overline{p}^2\end{cases}$$

$$\psi_n(x)=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2x^2\right)H_n(\alpha x)$$

$$\overline{x}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^* x\psi_n\mathrm{d}x=\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-\alpha^2x^2}H_n^{\ 2}(\alpha x)\mathrm{d}x=0$$

被积函数是x的奇函数

$$\overline{p}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*\hat{p}\psi_n\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi_n\mathrm{d}x$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_n)^*\psi_n\mathrm{d}x=\mathrm{i}\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n\frac{\partial}{\partial x}\psi_n^*\mathrm{d}x$$

$$=-\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x})\psi_n\mathrm{d}x=-\overline{p}\Rightarrow\overline{p}=0$$

ψ_n 为实函数

于是：

$$\begin{cases}\overline{x^2}=\overline{(\Delta x)^2}\\ \overline{p^2}=\overline{(\Delta p)^2}\end{cases}$$

$$E=\bar{H}=\frac{\overline{p^2}}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\overline{x^2}=\frac{\overline{(\Delta p)^2}}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\overline{(\Delta x)^2}$$

$\because\quad \overline{(\Delta x)^2}\,\overline{(\Delta p_x)^2}\geq\hbar^2/4$ 为求 E 的最小值，取式中等号

$$\overline{(\Delta x)^2}\,\overline{(\Delta p)^2}=\hbar^2/4\Rightarrow\overline{(\Delta p_x)^2}=\hbar^2\Big/4\overline{(\Delta x)^2}$$

则：

$$E=\frac{\hbar^2}{8\mu\overline{(\Delta x)^2}}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\overline{(\Delta x)^2}=\frac{\hbar^2}{8\mu y}+\frac{1}{2}\mu\omega^2 y\geq 2\sqrt{\frac{\hbar^2}{8\mu y}}\sqrt{\frac{1}{2}\mu\omega^2 y}=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

用另一种办法，求极值：

$$\frac{\partial E}{\partial y}=-\frac{\hbar^2}{8\mu y^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2=0,\quad\frac{\partial^2 E}{\partial y^2}=\frac{\hbar^2}{4\mu y^3}>0$$

解得：

$$y=\frac{\hbar}{2\mu\omega}=\overline{(\Delta x)^2}=\overline{x^2}\quad(\Rightarrow\sqrt{\overline{x^2}}=A_0/2)$$

因均方偏差不能小于零，故 y 取正

$$E_{\min}=\frac{\hbar^2}{8\mu\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\left(\frac{\hbar}{2\mu\omega}\right)=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

零点能正是不确定关系所要求的最小能量

经典情况：在ξ到ξ+dξ之间的区域内找到质点的概率$w(\xi)\,\mathrm{d}\xi$与质点在此区域内逗留的时间dt成比例

$$w(\xi)\mathrm{d}\xi=\mathrm{d}t/T$$

T是振动周期。因此：几率密度与质点的速度成反比

$$w(\xi)=\frac{1}{T\,\mathrm{d}\xi/\mathrm{d}t}=1/vT$$

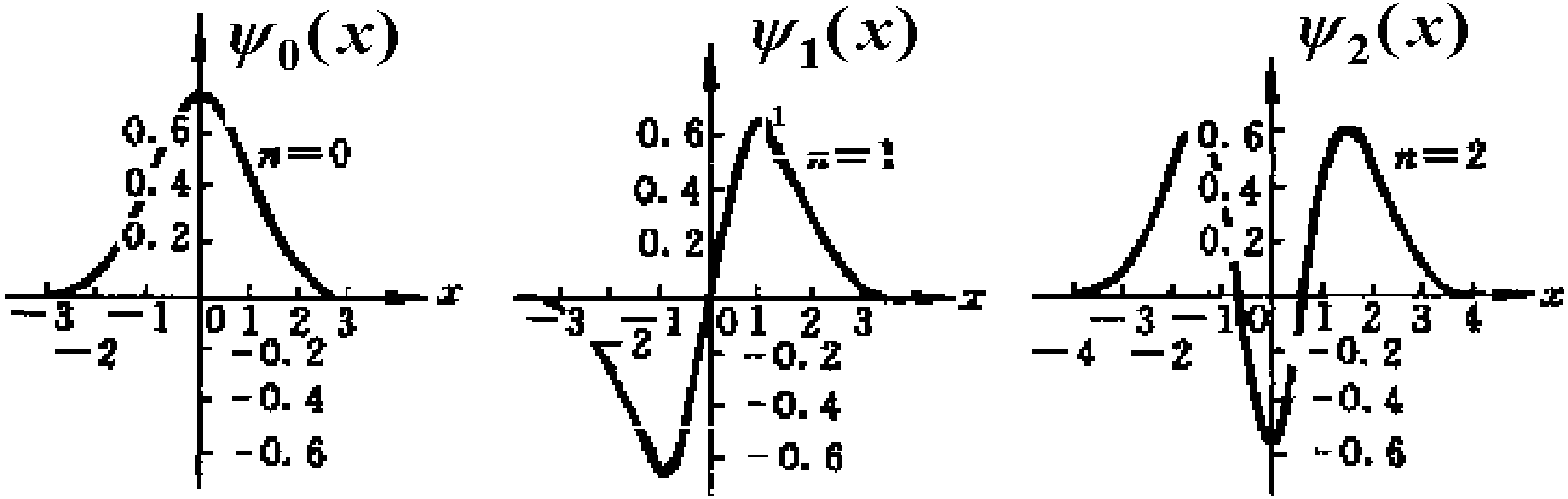
即，在$x=a$(两端)找到粒子的概率最大

对于经典的线性谐振子，$\xi=A\sin(\omega t+\delta)$，所在$\xi$点的速度为

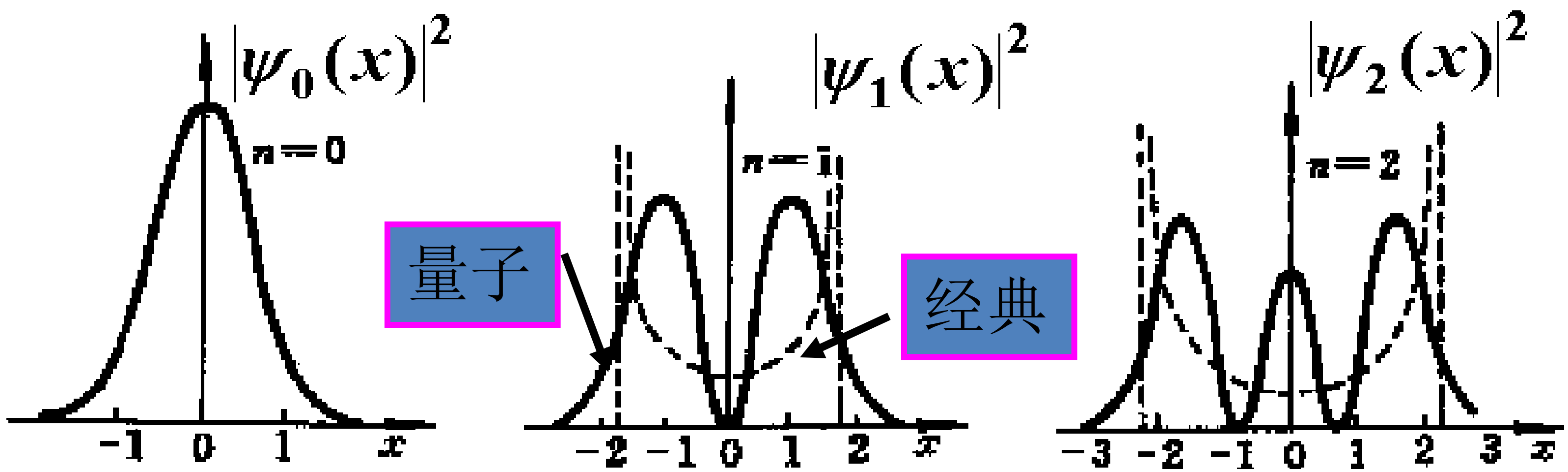
$$v=\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t}=A\omega\cos(\omega t+\delta)=A\omega(1-\xi^2/A^2)^{1/2}$$

所以，概率密度与 $(1-\xi^2/A^2)^{-1/2}$ 成正比

经典与量子的对比：

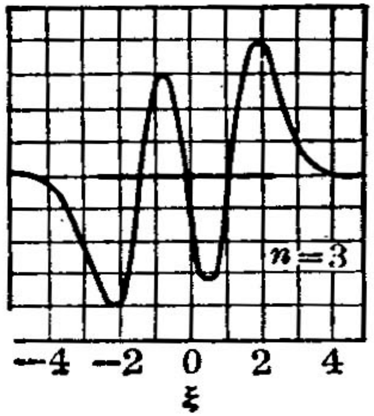


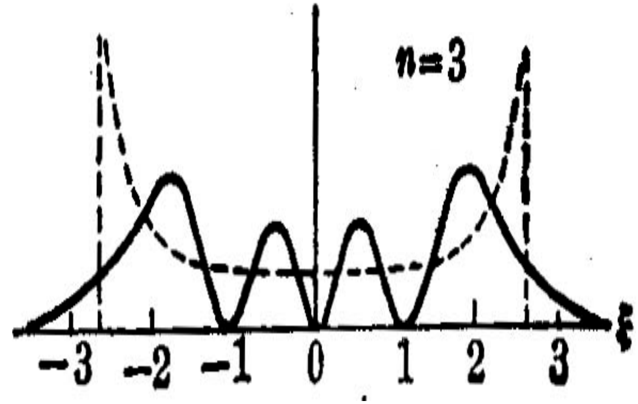
线性谐振子的波函数



线性谐振子的位置概率密度分布

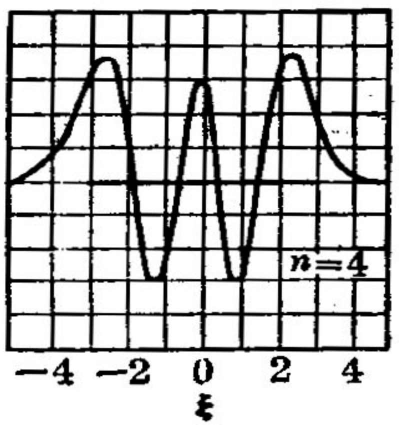
$\psi_3(x)$

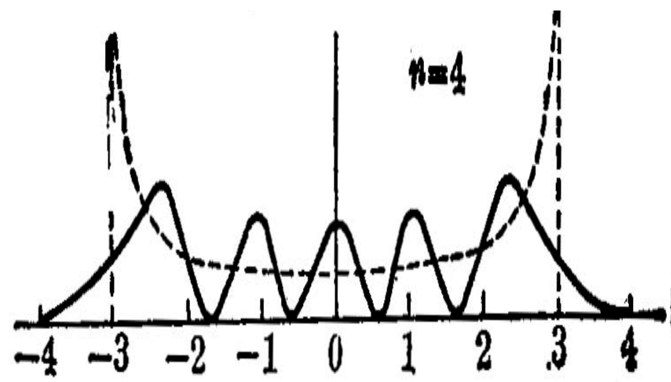




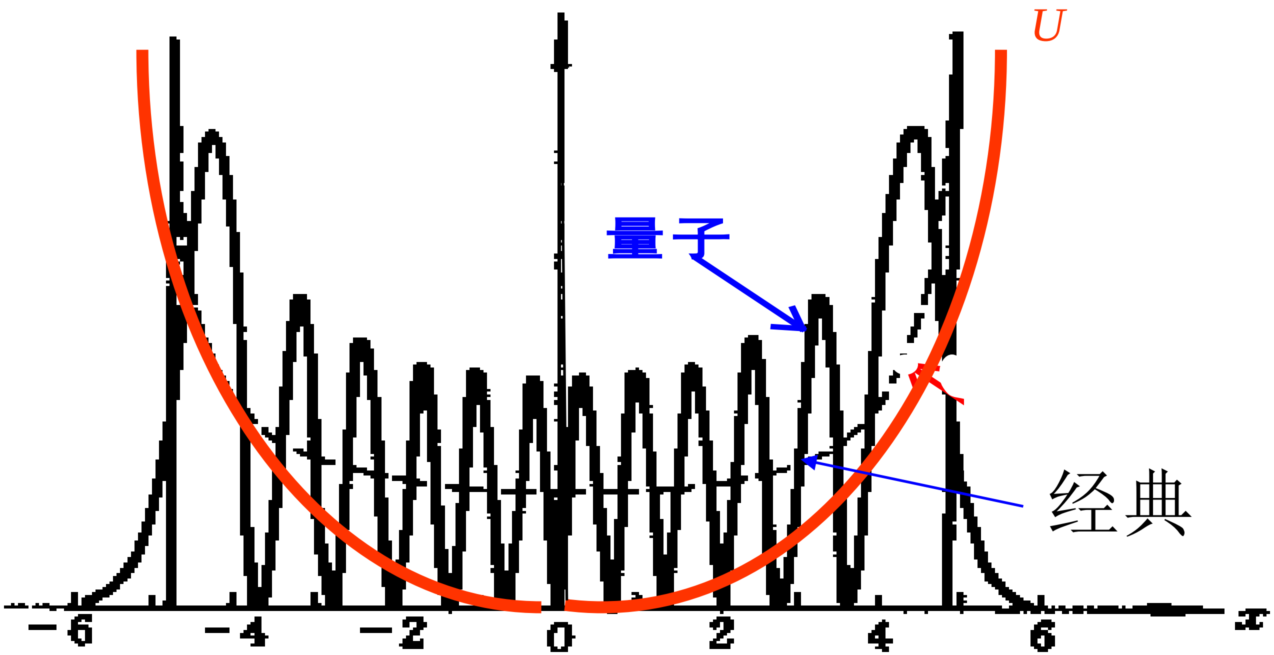
$\left|\psi_3\right|^2$

$\psi_4(x)$





$\left|\psi_4\right|^2$



n=11时的概率密度分布

从以上本征函数与概率密度曲线图看出，量子力学的谐振子波函数ψ_n有 n 个节点，在节点处找到粒子的概率为零。而经典力学的谐振子在 [-A, A] 区间每一点上都能找到粒子，没有节点。

例1. 求解三维各向同性谐振子，并讨论它的简并情况

- 解：

（1）三维谐振子 Hamilton 量

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2}\right] + \frac{1}{2}\mu\omega^2(x^2 + y^2 + z^2)$$

$$= \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z$$

其中

$$\hat{H}_x = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2,\ \hat{H}_y = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 y^2,$$

$$\hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}z^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 z^2$$

(2) S－方程及能量本征值

因为 Hamiltonian 可以写成

$$\hat{\boldsymbol{H}} = \hat{\boldsymbol{H}}_x + \hat{\boldsymbol{H}}_y + \hat{\boldsymbol{H}}_z$$

则必有

$$E = E_x + E_y + E_z$$

$$\Psi_N = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)$$

分离变量，波函数三方向分量对应的方程为：

$$\begin{cases} \hat{H}_x \psi_{n_x}(x) = E_{n_x}\psi_{n_x}(x) \\ \hat{H}_y \psi_{n_y}(y) = E_{n_y}\psi_{n_y}(y) \\ \hat{H}_z \psi_{n_z}(z) = E_{n_z}\psi_{n_z}(z) \end{cases}$$

解得能量本征值为：

$$E_{n_i} = (n_i + \tfrac{1}{2})\hbar\omega, \quad i = x, y, z$$

$$E_N = (n_x + n_y + n_z + \tfrac{3}{2})\hbar\omega$$

$$= (N + \tfrac{3}{2})\ \hbar\omega$$

$$N = n_x + n_y + n_z$$

能量本征函数：

$$\psi_{n_i}(\xi) = N_{n_i} e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H_{n_i}(\xi)$$

$$\Psi_N = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)$$

简并度：

$$\begin{cases} E_N = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2})\hbar\omega \\ \Psi_N = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \end{cases}$$

（谐振子）

若其中一个 $n_j = k$，由于受 $n_1 + n_2 + n_3 = N$ 的制约，则另一个 n_j 可以取 0，1，…，$N - k$ 这样的 $(k+1)$ 数值；最后一个 n_j 无可选择地取 $N-k, N-k-1, \cdots, 0$. 因此同一个能级对应的态数即能级的简并度为

$$f_N = \sum_{k=0}^{N}(k+1) = \frac{1}{2}(\text{首项}+\text{末项}) \times \text{项数} = \frac{1}{2}(N+2)(N+1)$$

简并度：

$$\begin{cases} E_N = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2\mu V^{2/3}}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \\ \Psi_N = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \end{cases}$$

（势阱）

$(1,1,1)$

$(1,1,2);(1,2,1);(2,1,1)$

$(1,2,3);(1,3,2);(2,1,3);(2,3,1);(3,1,2):(3,2,1)$

例2. 电荷为q 的谐振子，受到沿 x 方向的外电场 ε 的作用，其势场为：

$$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2-q\varepsilon x$$

求能量本征值和本征函数。

解：Schrodinger方程：

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)+\frac{2\mu}{\hbar^2}[E-V(x)]\psi(x)=0$$

（1）解题思路

势$V(x)$是在谐振子势上叠加上$-q\varepsilon x$项，该项是x 的一次项，而振子势是二次项。如果我们能把这样的势场重新整理成坐标变量二次项形式，就可能利用已知的线性谐振子的结果。

（2）改写 $V(x)$

$$V(x)=\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2-q\varepsilon x$$
$$=\frac{1}{2}\mu\omega^2(x-\frac{q\varepsilon}{\mu\omega^2})^2-\frac{q^2\varepsilon^2}{2\mu\omega^2}$$
$$=\frac{1}{2}\mu\omega^2(x-x_0)^2-U_0$$

其中：$x_0=\dfrac{q\varepsilon}{\mu\omega^2}$，$U_0=\dfrac{q^2\varepsilon^2}{2\mu\omega^2}$

（3）Hamilton量 $x_0=\dfrac{q\varepsilon}{\mu\omega^2},\ U_0=\dfrac{q^2\varepsilon^2}{2\mu\omega^2}$

进行变量变换：

$$x'=x-x_0,\ \hat{p}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}=-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x'}=\hat{p}'$$

则 Hamilton 量变为：

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2(x-x_0)^2-U_0$$

$$=\frac{\hat{p}'^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x'^2-U_0$$

（4）Schrodinger方程和解

新坐标下 Schrodinger 方程改写为：

该式是一新坐标下一维线性谐振子Schrodinger方程，于是可以利用已有结果得：

$$\frac{d^2}{dx'^2}\psi(x') + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E - \frac{1}{2}\mu\omega^2 x'^2 + U_0]\psi(x') = 0$$

$$\frac{d^2}{dx'^2}\psi(x') + \frac{2\mu}{\hbar^2}[E' - \frac{1}{2}\mu\omega^2 x'^2]\psi(x') = 0$$

其中，$E' = E + U_0$

本征能量

$$E'_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega,$$

$$E_n = E'_n - U_0$$

$$= (n + \frac{1}{2})\hbar\omega - \frac{q^2\varepsilon^2}{2\mu\omega^2},$$

$$n = 0, 1, 2, \cdots$$

本征函数

$$\psi_n(x') = N_n \exp(-\frac{\alpha^2 x'^2}{2}) H_n(\alpha x')$$

$$= N_n \exp[-\frac{\alpha^2 (x - x_0)^2}{2}] H_n[\alpha(x - x_0)]$$

例3 试证明$\psi(\mathrm{x})=\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(2\alpha^3x^3-3\alpha x)$是线性谐振子的波函数，并求此波函数对应的能量。

证：线性谐振子的S-方程为

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{dx}\psi(x)+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\psi(x)=E\psi(x) \qquad ①$$

把$\psi(x)$代入上式，有

$$\frac{d}{dx}\psi(x)=\frac{d}{dx}\left[\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(2\alpha^3x^3-3\alpha x)\right]$$

$$=\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}[-\alpha^2x(2\alpha^3x^3-3\alpha x)+(6\alpha^3x^2-3\alpha)]e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}$$

$$=\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(-2\alpha^5x^4+9\alpha^3x^2-3\alpha)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}=\frac{d}{dx}\left[\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(-2\alpha^5x^4+9\alpha^3x^2-3\alpha)\right]$$

$$=\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}\left[-\alpha^2xe^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(-2\alpha^5x^4+9\alpha^3x^2-3\alpha)+e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(-8\alpha^5x^3+18\alpha^3x)\right]$$

$$=(\alpha^4x^2-7\alpha^2)\sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2x^2}(2\alpha^3x^3-3\alpha x)$$

$$=(\alpha^4x^2-7\alpha^2)\psi(x)$$

把 $\frac{d^2}{dx^2}\psi(x)$ 代入①式左边，得

$$左边 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2\psi(x)$$

$$= 7\alpha^2\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi(x) - \frac{\hbar^2}{2\mu}\alpha^4 x^2\psi(x) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2\psi(x)$$

$$= 7\cdot\frac{\mu\omega}{\hbar}\cdot\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi(x) - \frac{\hbar^2}{2\mu}(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}})^4 x^2\psi(x) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2\psi(x)$$

$$= \frac{7}{2}\hbar\omega\psi(x) - \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2\psi(x) + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2\psi(x)$$

$$= \frac{7}{2}\hbar\omega\psi(x)$$

$$右边 = E\psi(x)$$

当 $E = \frac{7}{2}\hbar\omega$ 时，左边 = 右边。　n = 3

$\psi(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{3\sqrt{\pi}}}\frac{d}{dx}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}(2\alpha^3 x^3 - 3\alpha x)$，是线性谐振子的波函数，其对应的能量为 $\frac{7}{2}\hbar\omega$。

作业： P51: 3.1 3.5;

P95: 5.3

作业4：求二维各向同性谐振子的本征能级，波函数，及简并度（$n_x+n_y+1=N+1$）。

作业5：计算一维谐振子处于第一激发态时的

$$\Delta x,\ \Delta p,\ \Delta x\Delta p$$

作业6： 设粒子在下述势场中运动

$$U(x)=\begin{cases}\infty, & x<0\\ \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 & x>0.\end{cases}$$

求粒子的能级和波函数.

附录： **1.** 求线性谐振子哈密顿算符在动量表象的矩阵元.

解 将 $\hat{H}=\frac{p_x{}^2}{2\mu}+\frac{\mu\omega^2x^2}{2}$，$\psi_{p_x}(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}p_x x}$ 及 $(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p_x{}^2})\psi_{p_x}(x)=x^2\psi_{p_x}$ 代入

$$H_{p'p}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{p_x'}^*(x)\hat{H}\psi_{p_x}(x)\mathrm{d}x=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{p_x'}^*\frac{\hat{p}_x{}^2}{2\mu}\psi_{p_x}\mathrm{d}x+\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{p_x'}^*\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\psi_{p_x}\mathrm{d}x$$

$$=\frac{p_x^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{p_x'}^*\psi_{p_x}\mathrm{d}x+\frac{\mu\omega^2}{2}(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p_x{}^2})\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{p_x'}^*\psi_{p_x}\mathrm{d}x$$

$$=(\frac{p_x{}^2}{2\mu}-\frac{1}{2}\mu\omega^2\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial p_x{}^2})\delta(p_x-p_x')$$

附录： **2.** 试在动量表象求解谐振子的能级和波函数.

解 在动量表象中,谐振子的哈密顿算符为 $\hat{H}_p=\frac{p^2}{2\mu}-\frac{\mu\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}$. 薛定谔方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}c(p,t)=\left(\frac{p^2}{2\mu}-\frac{\mu\omega^2\hbar^2}{2}\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right)c(p,t)$$

采用分离变量法求解. 根据经验,寻找形如 $c(p,t)=c(p)\mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ 的解. 由此得定态薛定谔方程

$$c''(p)+\frac{2}{\mu\omega^2\hbar^2}\left(E-\frac{p^2}{2\mu}\right)c(p)=0.$$

令 $\eta=\beta p$, $\beta=\sqrt{\frac{1}{\mu\omega\hbar}}$, $\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}$,方程可简化为

$$\frac{\mathrm{d}^2c(\eta)}{\mathrm{d}\eta^2}+(\lambda-\eta^2)c(\eta)=0$$

与坐标表象中的定态薛定谔方程(见 1.5.3 节)相比较

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2}+(\lambda-\xi^2)\psi(\xi)=0$$

其数学形式完全相同,利用类比法可得解. 易见

$$\begin{cases} E_n = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega \\ \psi_n(x) = N_n \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} H_n(\alpha x) \\ N_n = \sqrt{\dfrac{\alpha}{2^n n!\ \sqrt{\pi}}} \end{cases} \quad \rightarrow \quad \begin{cases} E_n = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega \\ c_n(p) = N_n \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\beta^2 p^2} H_n(\beta p) \\ N_n = \sqrt{\dfrac{\beta}{2^n n!\ \sqrt{\pi}}} \end{cases}$$

附录：4. 求一维谐振子处在第一激发态时粒子出现概率最大的位置。

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}}} \cdot 2\alpha x e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

$$\omega_1(x) = \left|\psi_1(x)\right|^2 = 4\alpha^2 \cdot \frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \cdot x^2 e^{-\alpha^2 x^2}$$

$$= \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}} \cdot x^2 e^{-\alpha^2 x^2}$$

$$\frac{d\omega_1(x)}{dx} = \frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}}[2x - 2\alpha^2 x^3]e^{-\alpha^2 x^2} = 0$$

$$x = 0,\ \pm\frac{1}{\alpha},\ \pm\infty$$

$$x = 0,\ \pm\infty \quad \Rightarrow \quad \omega_1(x) = 0$$

而 $$\frac{d^2\omega_1(x)}{dx^2}=\frac{2\alpha^3}{\sqrt{\pi}}[(2-6\alpha^2x^2)-2\alpha^2x(2x-2\alpha^2x^3)]e^{-\alpha^2x^2}$$

$$=\frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}}[(1-5\alpha^2x^2-2\alpha^4x^4)]e^{-\alpha^2x^2}$$

$$\frac{d^2\omega_1(x)}{dx^2}\Bigg|_{x=\pm\frac{1}{\alpha}}=-2\frac{4\alpha^3}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{e}<0$$

$$x=\pm\frac{1}{\alpha}=\pm\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$$ 是所求概率最大的位置

附录： 5．设一维谐振子初态为 $\psi(x,0)=\cos\frac{\theta}{2}\psi_0(x)+\sin\frac{\theta}{2}\psi_1(x)$

其中 θ 为实参数

试计算 t 时刻的波函数 $\psi(x,t)$； 计算能量平均值 $\overline{H}$

解答 一维谐振子 Hamilton 量 $H=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2$，则

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}Ht}{\hbar}}\psi(x,0).$$

初态处于基态 $\psi(x,0)=\psi_0(x)$，则有 t 时刻的波函数

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}Ht}{\hbar}}\psi(x,0)=\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}Ht}{\hbar}}\psi_0(x)=\psi_0(x)\,\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}\omega t}{2}}.$$

若 $\psi(x,0)=\psi_0(x)\cos\frac{\theta}{2}+\psi_1(x)\sin\frac{\theta}{2}$，则

t 时刻的波函数 $\psi(x,t)$ 为

$$\psi(x,t)=\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}Ht}{\hbar}}\psi(x,0)=\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}Ht}{\hbar}}\psi_0(x)\cos\frac{\theta}{2}+\mathrm{e}^{\frac{-\mathrm{i}Ht}{\hbar}}\psi_1(x)\sin\frac{\theta}{2}$$

$$=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}\omega t}{2}}\psi_0(x)\cos\frac{\theta}{2}+\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}3\omega t}{2}}\psi_1(x)\sin\frac{\theta}{2}.$$

能量期望值

$$
\begin{aligned}
\overline{H} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \psi^*(x,t) H\psi(x,t) = \frac{1}{2}\hbar\omega\cos^2\frac{\theta}{2} + \frac{3}{2}\hbar\omega\sin^2\frac{\theta}{2} \\
&= \left(\cos^2\frac{\theta}{2} + 3\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\frac{1}{2}\hbar\omega = \left(1 + 2\sin^2\frac{\theta}{2}\right)\frac{1}{2}\hbar\omega \\
&= (2-\cos\theta)\frac{1}{2}\hbar\omega = \left(1 - \frac{1}{2}\cos\theta\right)\hbar\omega.
\end{aligned}
$$

附录： 6 ． 求一维谐振子中，坐标算符、动量算符和能量算符在能量表象中的矩阵表示。

解：

$$x\psi_n(x)=\frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x)+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x)\right]$$

$$\frac{d}{dx}\psi_n(x)=\alpha\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1}(x)-\sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}(x)\right]$$

坐标算符、动量算符和能量算符在能量表象中的矩阵元分别为

$$x_{mn}=\int\psi_m^* x\psi_n dx=\frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1}\right]$$

$$p_{mn}=\int\psi_m^*\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)\psi_n dx=-i\hbar\alpha\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1}-\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1}\right]$$

$$H_{mn}=\int\psi_m^*\hat{H}\psi_n dx\quad=E_n\delta_{mn}\quad=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\delta_{mn}$$

所以，它们的矩阵表示分别是

$$x_{mn}=\frac{1}{\alpha}\left[\sqrt{\frac{n}{2}}\delta_{m,n-1}+\sqrt{\frac{n+1}{2}}\delta_{m,n+1}\right]$$

$$\begin{array}{cc|ccccc} & & & & n & & \\ & & 0 & 1 & 2 & 3 & \cdots \\ \hline m & 0 & 0 & \sqrt{1/2} & 0 & 0 & \cdots \\ & 1 & \sqrt{1/2} & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ & 2 & 0 & 1 & 0 & \sqrt{3/2} & \cdots \\ & 3 & 0 & 0 & \sqrt{3/2} & 0 & \cdots \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{array}$$

$$x=\frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$p=-i\hbar\frac{\alpha}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$H=\hbar\omega\begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3/2 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 5/2 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 7/2 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \ddots \end{pmatrix}$$

附录：一维谐振子处在基态 $\psi(x)=\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}e^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}$，求

(1)势能的平均值 $\overline{u}=\frac{1}{2}\mu\omega^2\overline{x^2}$ (2)动能的平均值 $\overline{T}=\frac{\overline{p^2}}{2\mu}$

(3)动量的几率分布函数 $\overline{F}=\int\psi^*(x)\hat{F}\psi^*(x)dx$

解：$\because \overline{x^2} = \frac{\alpha}{\pi^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx = \frac{2\alpha}{\pi^{1/2}} \int_0^{\infty} x^2 e^{-\alpha^2 x^2} dx$

由积分公式$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1} a^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$

代入上式中：$n=1, a=\alpha^2$，有$\overline{x^2} = \frac{2\alpha}{\pi^{1/2}} \frac{(2-1)!!}{2^2 (\alpha^2)^1} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}} = \frac{1}{2\alpha^2}$

$$\therefore \overline{u} = \frac{1}{2} \mu\omega^2 \overline{x^2} = \frac{1}{2} \mu\omega^2 \frac{1}{2\alpha^2} = \frac{\hbar\omega}{4}$$

(2)平均动能 $\overline{T} = \frac{\overline{p^2}}{2\mu}$

$$\overline{P^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{P}^2 \psi(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} (-i\hbar \frac{d}{dx})^2 e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} dx$$

$$= -\frac{\alpha\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} \frac{d^2}{dx^2} e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}} dx = -\frac{\alpha\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} -\alpha^2 (1-\alpha^2 x^2) e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

$$= -\frac{\alpha^3\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (\alpha^2 x^2 - 1) e^{-\alpha^2 x^2} dx = -\frac{2\alpha^3\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} (\alpha^2 x^2 - 1) e^{-\alpha^2 x^2} dx$$

利用积分公式 $\int_0^{\infty} e^{-ax^2}\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$ 和 $\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2}\mathrm{d}x = \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}a^n}\sqrt{\frac{\pi}{a}}$

$$\overline{P^2} = -\frac{2\alpha^3\hbar^2}{\sqrt{\pi}}[\alpha^2\frac{1!!}{2^2\alpha^2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}} - \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}}] = -\frac{\alpha^2\hbar^2}{2}$$

$$\therefore\ \overline{T} = \frac{\overline{P^2}}{2\mu} = \frac{1}{4\mu}\alpha^2\hbar^2 = \frac{\hbar^2}{4\mu}\frac{\mu\omega}{\hbar} = \frac{\hbar\omega}{4}$$

利用$\hat{P}$的厄米性，有：

$$\overline{P^2} = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_n^*(x)\hat{P}^2\psi_n(x)\mathrm{d}x = \overline{P^2} = \int_{-\infty}^{\infty}(\hat{P}\psi_n)^*(\hat{P}\psi_n)dx\sqrt{a^2+b^2}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\hat{P}^*\psi_n^*(\hat{P}\psi_n)\mathrm{d}x = \alpha^2\hbar^2\int[\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}][\sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}]\mathrm{d}x$$

$$\text{let } n=0,\ \overline{P^2} = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_1|^2\,\mathrm{d}x = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2}$$

(3) $\psi(x)$可用动量本征函数$\psi_p(x)$来展开： $\psi(x) = \int c(p)\psi_p(x)\mathrm{d}p$

$$\therefore c(p)=\int\psi_p^*(x)\psi(x)dx=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\int e^{-\frac{i}{\hbar}px}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}}e^{-\frac{\alpha^2x^2}{2}}dx$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}}\int e^{-\frac{i}{\hbar}px-\frac{\alpha^2x^2}{2}}dx=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}}\int e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x^2+\frac{2}{\alpha^2}\frac{i}{\hbar}p)}dx$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}}\int e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x+\frac{i}{\hbar}\frac{p}{\alpha^2})^2-\frac{p^2}{2\hbar^2\alpha^2}}dx=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}}e^{-\frac{p^2}{2\hbar^2\alpha^2}}\int e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x+\frac{i}{\hbar}\frac{p}{\alpha^2})^2}dx$$

$$=\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}}e^{-\frac{p^2}{2\hbar^2\alpha^2}}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2/2}}=\frac{1}{(\pi^{1/2}\hbar\alpha)^{1/2}}e^{-\frac{p^2}{2\hbar^2\alpha^2}}$$

动量几率密度(动量取值在p附近单位动量区间的几率密度):

$$\left|c(p)\right|^2=\frac{1}{\pi^{1/2}\hbar\alpha}e^{-\frac{p^2}{\hbar^2\alpha^2}}=e^{-\frac{p^2}{\hbar^2\alpha^2}}\cdot\frac{1}{\pi^{1/2}\hbar}\sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$$

$$=\frac{1}{\pi^{1/2}}\frac{e^{-\frac{p^2}{\hbar^2\alpha^2}}}{(\mu\omega\hbar)^{1/2}}=\frac{\beta}{\pi^{1/2}}e^{-\beta p^2}$$

实际上，$c(p)$ 就是以p为变量的谐振子的波函数 $\psi_0(p)$

又解，利用 $|c(p)|^2$ 求 $\overline{P^2}$ 和 $\overline{T}$（平均动能）

$$\overline{P^2} = \int_{-\infty}^{\infty} c_p^* \hat{p}^2 c_p dp = \int_{-\infty}^{\infty} |c_p|^2 p^2 dp = \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta^2 p^2} p^2 dp$$

$$= \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{2\beta^2} \sqrt{\frac{\pi}{\beta^2}} = \frac{1}{2\beta^2}$$

$$\therefore \overline{T} = \frac{\overline{P^2}}{2\mu} = \frac{1}{4\mu\beta^2} = \frac{\mu\omega\hbar}{4\mu} = \frac{\omega\hbar}{4}$$

附录：代数法求谐振子，粒子数表象

1.改写H

量子:
$$\begin{cases} \hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + \dfrac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 \\ [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \end{cases}$$

$$\hat{H} = \frac{m\omega}{2\hbar}\left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)\left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega}\hat{p}\right)\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega$$

定义新算符

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

$$a_-a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}(ip + m\omega x)(-ip + m\omega x)$$

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

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

$$a_+a_- = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}$$

$$\begin{cases} \hat{H} = \dfrac{\hat{p}^2}{2m} + \dfrac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 \\ [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} H = \hbar\omega\left(a_+a_- + \dfrac{1}{2}\right). \\ [a_-, a_+] = 1. \end{cases}$$

2.求定态S-方程

$$H\psi = E\psi$$

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

先证明： $H(a_{+}\psi) = (E + \hbar\omega)(a_{+}\psi)$

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

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

$$= a_{+}(H + \hbar\omega)\psi = a_{+}(E + \hbar\omega)\psi = (E + \hbar\omega)(a_{+}\psi).$$

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

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

$$= (E - \hbar\omega)(a_-\psi).$$

$\Rightarrow$ $a_\pm$ 叫作阶梯算符

有基态： $a_-\psi_0 = 0$

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

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

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

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$$ 基态函数

代入下方程：

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

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$ 基态能量

得激发态：

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

求归一化系数：

把 $E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$ 代入下式

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

$$\Rightarrow \begin{cases} a_- a_+ \psi_n = (n+1)\psi_n \\ a_+ a_- \psi_n = n\psi_n \end{cases}$$

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

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

因此：

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

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

$$\Rightarrow \begin{cases} a_{+}\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1} \\ a_{-}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1} \end{cases}$$

$$
\begin{cases}
\psi_n = \dfrac{1}{\sqrt{n!}}(a_+)^n \psi_0 ; \\[2ex]
\quad = \dfrac{1}{\sqrt{n!}}\left(\dfrac{m\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{n}{2}}\left(x - \dfrac{\hbar}{m\omega}\dfrac{d}{dx}\right)^n \psi_0(x) \\[2ex]
E_n = \left(n + \dfrac{1}{2}\right)\hbar\omega
\end{cases}
$$

结束！

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

$$
\begin{cases}
x = \sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega}}(a_+ + a_-) \\[2ex]
p = i\sqrt{\dfrac{\hbar m\omega}{2}}(a_+ - a_-)
\end{cases}
$$

粒子数表象：

$$a_+a_-\psi_n = n\psi_n \qquad a_+a_- = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}$$

令：$\hat{N} \equiv a_+a_-$，它与$\hat{H}$对易

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$$

$\hat{N}$是粒子数表象，是二次量子化的基础！