12：波动方程的基本解

#Quantum_Mechanics

现在，对于不同的势场 $V(x)$，我们来解一下上一节中得到的波动方程。我们的首要目标是得到系统处于各个能量本征态时态矢在位置算符本征矢上的投影，也就是上一节中提到的本征函数 $u_E(x)$。

最简单的情况是三维空间中的自由粒子。此时的波动方程是：

$$\nabla^2 u_E(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} u_E(x)$$

定义波矢 k，使得：

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2}$$

使用分离变量的方式解微分方程，也就是：

$$u_E(x) = u_x(x) u_y(y) u_z(z)$$

容易得到微分方程的解是：

$$u_E(x) = c_x c_y c_z \exp(ik_x x + ik_y y + ik_z z) = C \exp(ik \cdot x)$$

为了求出 C，我们使用一种方法：假设我们研究的区域在一个边长为 L 的立方体盒子中，并且在盒子上使用周期性的边界条件（例如，要求盒子的边缘是波节），因此：

$$u_x(x+L) = u_x(x) \Rightarrow k_x = \frac{2\pi}{L} n_x$$

其余两个方向同理。
概率归一化条件要求：

$$1 = \int_0^L dx \int_0^L dy \int_0^L dz \, u_E^\star(x) u_E(x) = L^3 |C|^2$$

从而立刻得到：

$$u_E(x) = \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}} \exp(ik \cdot x)$$

能量的所有本征值是：

$$E=\frac{p^2}{2m}=\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2(n_x^2+n_y^2+n_z^2)$$

这里有很严重的简并，很多不同的 n_x,n_y,n_z 组合可以给出相同的 E。我们可以计算态的密度。考虑波矢空间中半径为 $|k|=\frac{2\pi|n|}{L}$ 的球壳，很容易计算态密度：

$$\frac{\mathrm{d}N}{\mathrm{d}E}=\frac{4\pi n^2d|n|}{\hbar^2|k|d|k|\cdot\frac{1}{m}}=\frac{m^{\frac{3}{2}}E^{\frac{1}{2}}L^3}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}$$

这个"大盒子"的操作也可以计算之前的概率流。直接把归一化因子放进之前的平面波里：

$$\psi(x,t)=\frac{1}{L^{\frac{3}{2}}}\exp\left(\frac{ip\cdot x}{\hbar}-\frac{iEt}{\hbar}\right)\Rightarrow j(x,t)=\frac{\hbar k}{m}\frac{1}{L^3}$$

概率流沿着波矢方向传播。

另一个比较简单的情况是简谐振子：$V(x)=\frac{m\omega^2x^2}{2}$，现在要解微分方程：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2u_E(x)=Eu_E(x)$$

为了求解上面的微分方程，我们要引入生成函数的概念。首先使用无量纲的变量将上式写成：

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}y^2}u(y)+(\epsilon-y^2)u(y)=0$$

我们知道，微分方程 $w''(y)-y^2w(y)=0$ 有解 $w(y)\propto\exp(-\frac{y^2}{2})$，那么我们会构造如下形式的解：

$$u(y)=h(y)\exp\left(-\frac{y^2}{2}\right)$$

其实就是常数变易法。我们把它代回去：

$$\frac{\mathrm{d}^2h}{\mathrm{d}y^2}-2y\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}y}+(\epsilon-1)h(y)=0$$

学生只要解这个方程就好了，然而作者要考虑的就多了！通常的做法是给 $h(y)$ 找个级数解，如果级数在某一项终止了，那么这就是一个合理的解。不过这里我们找一个新的做法：考虑由生成函数 $g(x,t)=\exp(-t^2+2tx)$ 生成的厄尔米特多项式，也就是：

$$g(x,t)=\exp(-t^2+2tx)=\sum_{n=0}^{\infty}H_n(x)\frac{t^n}{n!}$$

注意到：

$$g(0,t)=\exp(-t^2)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}t^{2n}$$

因此，对于奇数 n，有 $H_n(0)=0$。假如我们现在令 n 只能取偶数，也就是 $n=0,2,4,\cdots$，那么上式可以被重写为：

$$g(0,t)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^{\frac{n}{2}}}{(\frac{n}{2})!}\frac{n!}{n!}t^n\Rightarrow H_n(0)=(-1)^{\frac{n}{2}}\frac{n!}{(\frac{n}{2})!}$$

另一个显然的性质是：

$$H_n(x)=(-1)^nH_n(x)$$

我们现在建立厄尔米特多项式各个项之间的递推关系，通过求导它的定义式，我们可以得到两个关系：

$$\frac{\partial g}{\partial x}=2tg(x,t)=\sum_{n=0}^{\infty}2(n+1)H_n(x)\frac{t^{n+1}}{(n+1)!}$$

以及：

$$\frac{\partial g}{\partial x}=\sum_{n=0}^{\infty}H_n'(x)\frac{t^n}{n!}$$

结合以上两式，递推关系就出来了：

$$H_n'(x)=2nH_{n-1}(x)$$

现在将生成函数对 t 求导：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial g}{\partial t} &= -2tg(x,t) + 2xg(x,t) \\
&= -\sum_{n=0}^{\infty} 2H_n(x)\frac{t^{n+1}}{n!} + \sum_{n=0}^{\infty} 2xH_n(x)\frac{t^n}{n!} \\
&= -\sum_{n=0}^{\infty} 2nH_{n-1}(x)\frac{t^n}{n!} + \sum_{n=0}^{\infty} 2xH_n(x)\frac{t^n}{n!}
\end{aligned}
$$

或者我们也可以直接将 g 的展开式对 t 求导:

$$
\frac{\partial g}{\partial t} = \sum_{n=0}^{\infty} nH_n(x)\frac{t^{n-1}}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} H_{n+1}(x)\frac{t^n}{n!}
$$

对比以上两式，立刻得到关系:

$$
H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)
$$

考虑 $H_n(x)$ 的递推式:

$$
\begin{aligned}
H_n''(x) &= 2n \cdot 2(n-1)H_{n-2}(x) \\
&= 2n[2xH_{n-1}(x) - H_n(x)] \\
&= 2xH_n'(x) - 2nH_n(x)
\end{aligned}
$$

那么，$H_n(x)$ 符合上面关于 $h(y)$ 的方程，其中 $\epsilon - 1 = 2n$，也就是说，谐振子的波函数:

$$
u_n(x) = c_n H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)
$$

其中 c_n 可以由厄尔米特多项式的正交关系计算。

现在看一个阴间点的线性势场：$V(x) = k|x|$，那么我们要解的微分方程是:

$$
-\frac{h^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2u_E}{\mathrm{d}x^2} + k|x|u_E(x) = Eu_E(x)
$$

我们可以只看正半轴。根据对称性，我们可以有两种解：$u_E(-x) = +u_E(x)$ 或者 $u_E(-x) = -u_E(x)$。如果取正号，那么连续性要求 $u_E'(0) = 0$；如果取负号，连续性要求 $u_E(0) = 0$。在后面讨论对称性和守恒量时，我们分别称这两种解具有偶的或奇的宇称。

我们将上面的方程无量纲化:

$$
\frac{\mathrm{d}^2u_E}{\mathrm{d}y^2} - 2(y-\epsilon)u_E(y) = 0
$$

换元，令 $z=2^{\frac{1}{3}}(y-\epsilon)$，上面的方程可以被重新写成：

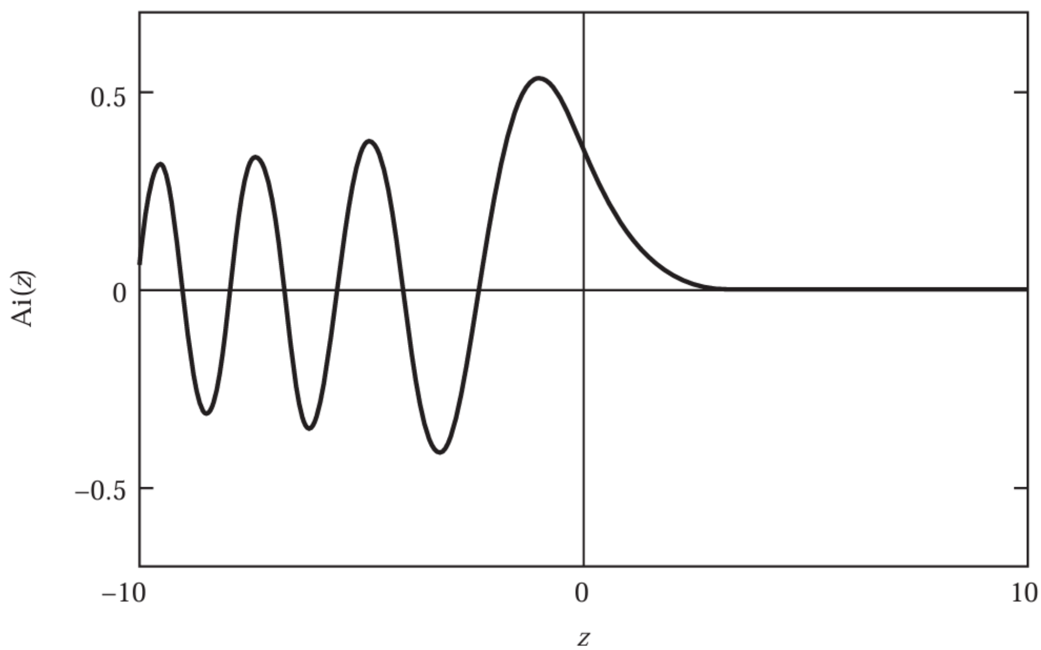
$$\frac{\mathrm{d}^2u_E}{\mathrm{d}z^2}-zu_E(z)=0$$

这个方程称为 Airy 方程，它的解称为 Airy 函数。我们不给出显式表达式，只给出图像：

$$\mathrm{Ai}'(z)=0 \qquad \text{for } z=-1.019,\ -3.249,\ -4.820,\ldots \qquad \text{(even)} \qquad (2.238)$$

$$\mathrm{Ai}(z)=0 \qquad \text{for } z=-2.338,\ -4.088,\ -5.521,\ldots \qquad \text{(odd)}. \qquad (2.239)$$

For example, the ground-state energy is $E=(1.019/2^{1/3})(\hbar^2k^2/m)^{1/3}$.



现在我们来介绍 WKB 近似，也就是所谓半经典近似。这种近似的条件是：波长远小于是能变化的尺度。这里我们只考虑一维的情况，要求解的方程是：

$$\frac{\mathrm{d}^2u_E}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))u_E(x)=0$$

参数化方程中的一些量：

$$k(x)=\left[\frac{2m}{\hbar^2}(E-V(x))\right]^{\frac{1}{2}}\ \ (E>V(x))$$

$$k(x)=-i\kappa(x)=-i\left[\frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\right]^{\frac{1}{2}}$$

待解的方程变成：

$$\frac{\mathrm{d}^2 u_E}{\mathrm{d}x^2}+[k(x)]^2 u_E(x)=0$$

显然，如果 $k(x)$ 是常值，那么我们就会有很简单的解：$u(x)\propto\exp(\pm ikx)$，那么在 $V(x)$ 随着 x 变化缓慢时，我们猜方程的解是：

$$u_E(x)=\exp\left(\frac{iW(x)}{\hbar}\right)$$

将这个解代入原方程有：

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}^2 W}{\mathrm{d}x^2}-\left(\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}x}\right)^2+\hbar^2[k(x)]^2=0$$

我们在这里引入 $V(x)$ 的缓变近似：

$$\hbar|\frac{\mathrm{d}^2 W}{\mathrm{d}x^2}|\ll|\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}x}|^2$$

从而可以得到 $W(x)$ 的最低阶近似：

$$W_0'(x)=\pm\hbar k(x)$$

将这个结果代入原方程，得到：

$$\left(\frac{\mathrm{d}W_1}{\mathrm{d}x}\right)^2=\hbar^2[k(x)]^2+i\hbar^2 k'(x)$$

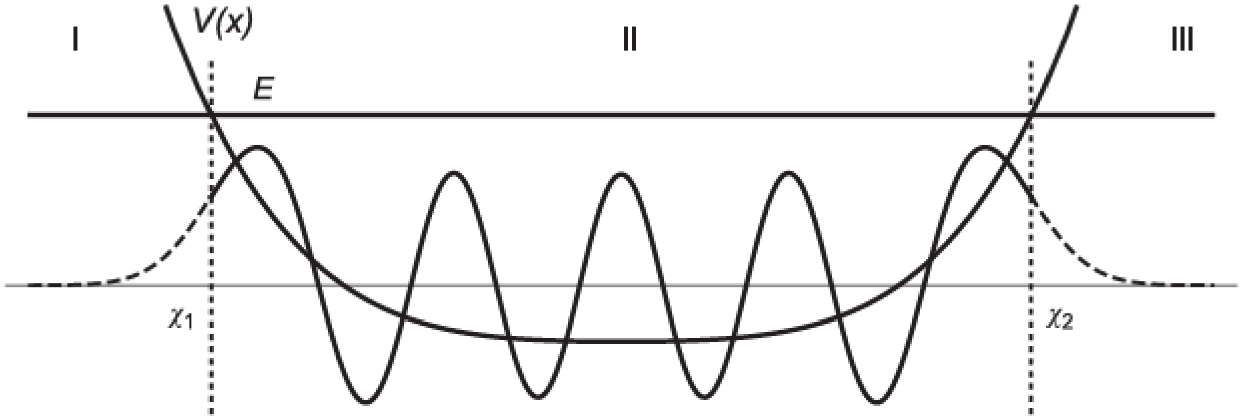
由于第二项比第一项小得多，我们得到：

$$\begin{aligned}W(x)&\approx W_1(x)\\&=\pm\hbar\int dx'[k^2(x')\pm ik'(x')]^{\frac{1}{2}}\\&\approx\pm\int dx'k'(x)\left[1\pm\frac{i}{2}\frac{k'(x)}{k^2(x')}\right]\\&=\pm\hbar\int dx'k(x')+\frac{i}{2}\hbar\ln[k(x)]\end{aligned}$$

这就是所谓 WKB 近似：

$$u_E(x)\approx\exp\left(\frac{iW(x)}{\hbar}\right)=\frac{1}{|k(x)|^{\frac{1}{2}}}\exp\left(\pm i\int dx'k(x')\right)$$

接下来我们处理一个实际问题：考虑一下下面的势场：



在 $V(x)=E$ 点附近，将 $V(x)$ 线性近似（注意这里 WKB 近似的条件不被满足！），考虑到 $z\propto(V(x)-E)$，以及 $Ai(x)$ 的渐进形式：

$$Ai(z)\to\frac{1}{2\sqrt{\pi}}z^{-\frac{1}{4}}\exp\left(-\frac{2}{3}z^{\frac{3}{2}}\right)\quad z\to+\infty$$

$$Ai(z)\to\frac{1}{\sqrt{\pi}}|z|^{-\frac{1}{4}}\cos\left(\frac{2}{3}|z|^{\frac{3}{2}}-\frac{\pi}{4}\right)\quad z\to-\infty$$

那么我们可以在势场的两个边界上得到两个关系：

For connecting regions I and II, the correct linear combination of the two solutions (2.250) is determined by choosing the integration constants in such a way that

$$\left\{\frac{1}{[V(x)-E]^{1/4}}\right\}\exp\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_x^{x_1}dx'\sqrt{2m[V(x')-E]}\right]$$
$$\to\left\{\frac{2}{[E-V(x)]^{1/4}}\right\}\cos\left[\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{x_1}^{x}dx'\sqrt{2m[E-V(x')]}-\frac{\pi}{4}\right]. \tag{2.252}$$

Likewise, from region III into region II we have

$$\left\{\frac{1}{[V(x)-E]^{1/4}}\right\}\exp\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{x_2}^{x}dx'\sqrt{2m[V(x')-E]}\right]$$
$$\to\left\{\frac{2}{[E-V(x)]^{1/4}}\right\}\cos\left[-\left(\frac{1}{\hbar}\right)\int_{x}^{x_2}dx'\sqrt{2m[E-V(x')]}+\frac{\pi}{4}\right]. \tag{2.253}$$

从这两个关系中，我们可以得到所谓索末菲量子化条件：

$$\int_{x_1}^{x_2}dx\sqrt{2m[E-V(x)]}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar\Rightarrow\oint pdq=n\hbar$$

这个关系可以用于处理一些问题，例如在重力场里面弹跳的中子：

$$V=\begin{cases} mgx & x>0 \\ \infty & x<0 \end{cases}$$

令：

$$x_1=0 \quad x_2=\frac{E}{mg}$$

然而，其实我们前面给出索末菲条件的时候允许波函数进入 $x\leq x_1$，但是上面这个情形里面我们不允许。因此更好的方式是考虑如下的势场：

$$V(x)=mg|x|$$

那么，取 $x_1=-\dfrac{E}{mg}, x_2=\dfrac{E}{mg}$，我们得到：

$$\int_{x_1}^{x_2} dx\sqrt{2m(E-mg|x|)}=\left(n_{odd}+\frac{1}{2}\right)\pi\hbar$$

从而得到：

$$E_n=\left\{\frac{[3(n-\frac{1}{4})\pi]^{\frac{2}{3}}}{2}\right\}(mg^2\hbar^2)^{\frac{1}{3}}$$

这个近似在 n 很小时都是高精度的。注意到 WKB 成立的条件等价于：

$$\lambda=\frac{\hbar}{\sqrt{2m[E-V(x)]}}\ll\frac{2[E-V(x)]}{|dV/dx|}$$

也就是说，物质波的波长应该远小于势能变化的特征长度。