量子力学

Chapter 6. 一维量子力学体系

杨焕雄

中国科学技术大学物理学院

hyang@ustc.edu.cn

November 18, 2023

目录

一维薛定谔方程

我们已经对量子力学的基本原理与方法有了一定程度的了解. 本章我们以一维量子力学体系为例, 获取一些量子力学分析问题、解决问题的经验.

1. 采取薛定谔绘景. 暂设

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + V(x)$$

则在位置表象中, 体系的状态波函数 $\Psi(x, t)$ 随时间的自然演化遵循如下一维薛定谔方程:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,\ t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\Psi(x,\ t)$$

此方程有定态特解:

$$\Psi_E(x,\ t) = \psi_E(x)\exp\left(-iEt/\hbar\right)$$

这里 $\psi_E(x)$ 实际上是哈密顿算符属于能量本征值 E 的能量本征函数：

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi_E(x)}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi_E(x)=E\,\psi_E(x)}$$

能量本征值方程亦称为定态薛定谔方程. 本章的主题就是通过求解它获得各类一维体系的量子力学信息.

- 在束缚态情形中，

$$\Psi(x)\Big|_{x\to\pm\infty}=0,\quad \forall\ |\Psi\rangle\in\mathcal{H}$$

能量本征函数能够正常归一化：

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi_E(x)\right|^2 dx=1 \quad\rightsquigarrow\quad E=E\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi_E(x)\right|^2 dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_E^*(x)\Big[E\psi_E(x)\Big]dx$$

所以，

$$
\begin{aligned}
E &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_E^*(x)\frac{\mathrm{d}^2\psi_E(x)}{\mathrm{d}x^2}dx+\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\left|\psi_E(x)\right|^2dx \\
&= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\psi_E^*(x)\frac{\mathrm{d}\psi_E(x)}{\mathrm{d}x}\bigg|_{-\infty}^{+\infty}+\frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\frac{\mathrm{d}\psi_E(x)}{\mathrm{d}x}\right|^2dx+\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\left|\psi_E(x)\right|^2dx \\
&= \frac{\hbar^2}{2\mu}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\frac{\mathrm{d}\psi_E(x)}{\mathrm{d}x}\right|^2dx+\int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\left|\psi_E(x)\right|^2dx \\
&\geqslant \int_{-\infty}^{+\infty}V(x)\left|\psi_E(x)\right|^2dx \geqslant V_{\mathrm{Min}}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi_E(x)\right|^2dx
\end{aligned}
$$

即体系束缚态能级存在下限：

$$
E \geqslant V_{\mathrm{Min}}
$$

自由粒子

自由粒子不参与和外界环境之间的相互作用, $V(x)=0$. 一维自由粒子的定态薛定谔方程是:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}=E\psi(x)$$

亦即,

$$\psi''(x)+k^2\psi(x)=0, \qquad k=\sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$$

此方程的一般解为:

$$\psi(x)=A(k)\exp(ikx)+A(-k)\exp(-ikx), \qquad -\infty<x<+\infty$$

物理上有意义的波函数在 $x\to\pm\infty$ 处不发散, 意味着参数 k 只能取正实数值.

因此, 自由粒子的能量本征值形成连续谱:

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\geqslant 0$$

通常把自由粒子的能量本征函数写为:

$$\psi_p(x) = A(p)\exp(ipx/\hbar)$$

这里 $p = k\hbar$ 诠释为粒子的动量, 其定义域为 $-\infty < p < +\infty$. 显然, 自由粒子的能量本征值可改写为

$$E = \frac{p^2}{2\mu}$$

它是二重简并的: 属于 E 的能量本征函数有两个, 即 $\psi_{\pm p}(x)$.

- 只需把 $\psi_p(x)$ 重新视为相容力学量完全集合 $\{\hat{\mathcal{H}}, \hat{P}\}$ 的共同本征函数, 即可解除能级的简并. 此处

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x), \qquad \hat{P} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

- 因为自由粒子能量本征值形成连续谱, $\psi_p(x)$ 不能正常归一化. 习惯上在 $\psi_p(x)$ 中取归一化常数为:

$$A(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

如此，

$$\boxed{\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(ipx/\hbar\right)}$$

其服从的正交归一条件为：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{p'}^*(x)\psi_p(x)dx = \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[i(p-p')x/\hbar\right]dx = \delta(p-p')$$

- 自由粒子含时的**定态**波函数是：

$$\Psi_p(x,t) = \psi_p(x)e^{-iEt/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left[i\left(p/\hbar\right)x - i\left(p^2/2\mu\hbar\right)t\right]$$

处于定态的自由粒子具有确定的动量 p，$\Delta p = 0$，其出现在 x 轴上各处的概率密度为

$$\rho(x,t) = \left|\Psi_p(x,t)\right|^2 = 1/2\pi\hbar \qquad \rightsquigarrow \qquad \Delta x = \infty$$

这个结论与海森堡测不准关系是相容的.

- 自由粒子也可以不处于某个定态,而是处在若干个定态的叠加态:

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty}dp\,A(p)\exp\left[i\,(p/\hbar)\,x-i\left(p^2/2\mu\hbar\right)\,t\right]$$

或者等价地,

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}dk\,A(k)\exp\left[ikx-i\omega(k)t\right]$$

式中,$\omega(k)=k^2\hbar/2\mu$. 此时应称自由粒子所处的量子态为德布罗意波包,$\Delta p\neq 0$,但海森堡测不准关系的成立不受影响. 倘若波幅 $A(k)$ 的贡献集中在 $k=k_0$ 附近,$A(k)\approx A(k_0)$,则

$$\Psi(x,t)\approx\frac{1}{\sqrt{2\pi}}A(k_0)\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k}dk\ \exp\left[ikx-i\omega(k)t\right]$$

在进行上述对波数 k 的积分时, 做变量代换 $k \to \zeta = k - k_0$, 并对 $\omega(k)$ 在 $\zeta = 0$ 处做泰勒展开

$$\omega(k) = \omega(k_0 + \zeta) = \omega(k_0) + \left.\frac{\mathrm{d}\omega(k)}{\mathrm{d}k}\right|_{k=k_0} \zeta + \mathscr{O}(\zeta^2) \approx \omega_0 + \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0 \zeta$$

所以, 自由粒子波包的波函数近似表为:

$$\Psi(x,t) \approx 2A(k_0) \frac{\sin\left\{\left[x - \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0 t\right] \Delta k\right\}}{\left[x - \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0 t\right]} \exp\left[i(k_0 x - \omega_0 t)\right]$$

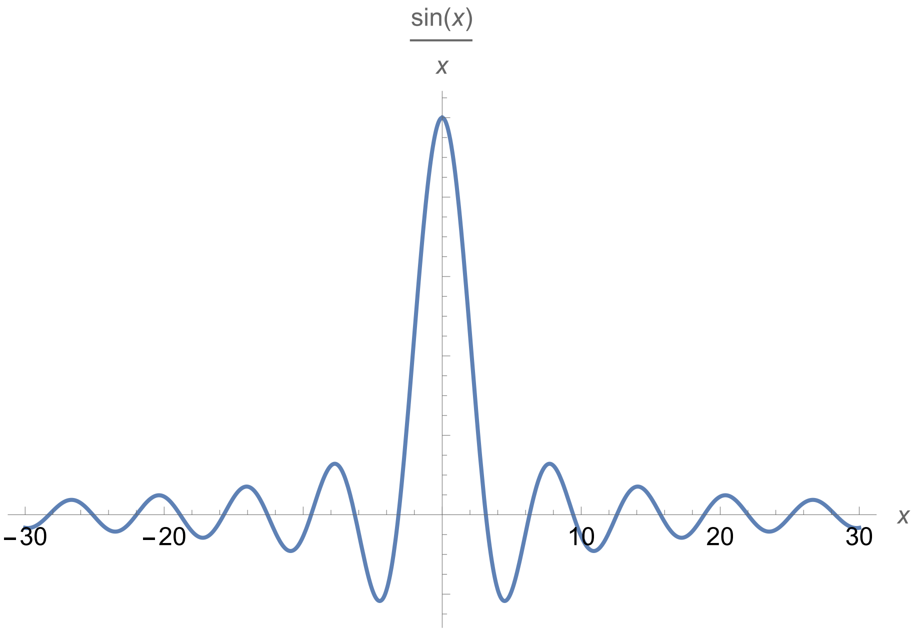
波包的中心位置 x_c 是代数方程

$$x - \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0 t = 0$$

的解, 其移动速度 v_g [亦称波包的群速度],

$$v_g = \left(\frac{\mathrm{d}\omega}{\mathrm{d}k}\right)_0 = \frac{k_0 \hbar}{\mu}$$

恰好是自由粒子的运动速度 $v_0 = p_0/\mu$.


$\frac{\sin(x)}{x}$
x
−30
−20
10
20
30

倘若伽利略知道量子力学

运动学问题离不开参考系与参考系之间的变换. 经典力学如此, 量子力学亦如此.

1. 假设存在两个惯性参考系 K 与 K', 彼此间的相对速度为 $V (V \ll c)$, 则此二惯性参考系间的伽利略变换可表为:

$$\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{V}t, \quad t' = t$$

2. 倘若时空中存在着一个静止质量为 μ 的非相对性自由质点, 其相对于惯性系 K 的动量与能量分别为 $\boldsymbol{p}$ 和 $E = \boldsymbol{p}^2/2\mu$, 则其相对于 K' 的动量与能量分别为:

$$\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p} - \mu\boldsymbol{V}, \quad E' = E - \boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{p} + \frac{1}{2}\mu V^2$$

3. 倘若时空中存在着一个质量为 μ 的非相对论性量子力学自由粒子, 其相对于两个惯性系的波函数分别为 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$ 与 $\Psi'(\boldsymbol{r}', t')$. **请问这两个波函数之间有何关系?**

顿悟:

倘若自由粒子处于动量算符的某一本征态, 粒子相对于两个惯性系 K 和 K' 的动量本征值分别为 $\boldsymbol{p}$ 与 $\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{p} - \mu\boldsymbol{V}$, 则在惯性系 K 的位置表象中我们有:

$$\Psi(\boldsymbol{r},\ t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - \frac{p^2 t}{2\mu}\right)\right]$$

而在惯性系 K' 系中,

$$\begin{aligned}
\Psi'(\boldsymbol{r}',\ t') &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}' - \frac{p'^2 t'}{2\mu}\right)\right] \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left[(\boldsymbol{p} - \mu\boldsymbol{V})\cdot(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{V}t) - \frac{(p^2 - 2\mu\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{p} + \mu^2 V^2)t}{2\mu}\right]\right\} \\
&= \exp\left[-\frac{i\mu}{\hbar}\left(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{r} - \frac{1}{2}V^2 t\right)\right] \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left[\frac{i}{\hbar}\left(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} - \frac{p^2 t}{2\mu}\right)\right] \\
&= \exp\left[-\frac{i\mu}{\hbar}\left(\boldsymbol{V}\cdot\boldsymbol{r} - \frac{1}{2}V^2 t\right)\right] \Psi(\boldsymbol{r},\ t)
\end{aligned}$$

上述结论显然符合人们对惯性参考系的基本期望，因为发现粒子的概率密度**不应**依赖于惯性系的选择：

$$\left|\Psi'(r', t')\right|^2 = \left|\Psi(r, t)\right|^2$$

薛定谔方程在伽利略变换下的不变性：

值得注意的是，波函数在不同惯性系中的变换

$$\boxed{\Psi'(r', t') = \exp\left[-\frac{i\mu}{\hbar}\left(V\cdot r - \frac{1}{2}V^2 t\right)\right]\Psi(r, t)}$$

在非相对论性量子力学中是普适的，并不限于动量算符的本征态．它实际上是**自由粒子薛定谔方程具有伽利略变换下不变性**的代价．检验如下．在伽利略变换下，

$$r' = r - Vt, \quad t' = t \quad \rightsquigarrow \quad \boxed{\frac{\partial r'}{\partial t} = -V, \quad \frac{\partial t'}{\partial t} = 1}$$

由此知:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}=\frac{\partial r'}{\partial t}\cdot\nabla'+\frac{\partial t'}{\partial t}\frac{\partial}{\partial t'}=\frac{\partial}{\partial t'}-V\cdot\nabla',\qquad \nabla=\nabla'}$$

假设波函数在伽利略变换下符合量子力学概率诠释的变换法则为:

$$\Psi(r,\ t)=e^{i\alpha(r',\ t')}\Psi'(r',\ t'),\qquad \forall\,\alpha(r',\ t')\in\mathbb{R}$$

我们有:

$$\begin{aligned}\frac{\partial\Psi(r,\ t)}{\partial t}&=\left(\frac{\partial}{\partial t'}-V\cdot\nabla'\right)\left[e^{i\alpha(r',\ t')}\Psi'(r',\ t')\right]\\&=e^{i\alpha}i\left(\frac{\partial\alpha}{\partial t'}-V\cdot\nabla'\alpha\right)\Psi'(r',\ t')+e^{i\alpha}\left[\frac{\partial\Psi'(r',\ t')}{\partial t'}-V\cdot\nabla'\Psi'(r',\ t')\right]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\nabla\Psi(r,\ t)&=\nabla'\left[e^{i\alpha(r',\ t')}\Psi'(r',\ t')\right]\\&=e^{i\alpha}\left[i(\nabla'\alpha)\Psi'(r',\ t')+\nabla'\Psi'(r',\ t')\right]\end{aligned}$$

同理有:

$$\nabla^2\Psi(r,\ t) = e^{i\alpha}\left[\nabla'^2\Psi'(r',\ t') + 2i(\nabla'\alpha)\cdot\nabla'\Psi'(r',\ t')\right.$$
$$\left.-(\nabla'\alpha)^2\Psi'(r',\ t') + i(\nabla'^2\alpha)\Psi'(r',\ t')\right]$$

倘若自由粒子的薛定谔方程具有伽利略变换下的不变性,即在惯性系 K 和 K' 中分别有:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(r,\ t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\Psi(r,\ t), \qquad i\hbar\frac{\partial\Psi'(r',\ t')}{\partial t'} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla'^2\Psi'(r',\ t')$$

波函数的变换参数 $\alpha(r',\ t')$ 须服从约束条件:

$$\left(\frac{\partial\alpha}{\partial t'} - V\cdot\nabla'\alpha\right)\Psi'(r',\ t') + iV\cdot\nabla'\Psi'(r',\ t')$$
$$= \frac{\hbar}{2\mu}\left[2i(\nabla'\alpha)\cdot\nabla'\Psi'(r',\ t') - (\nabla'\alpha)^2\Psi'(r',\ t') + i(\nabla'^2\alpha)\Psi'(r',\ t')\right]$$

此约束条件应对任意的波函数都成立,所以:

$$\frac{\hbar}{\mu}\nabla'\alpha = V, \qquad \frac{\partial\alpha}{\partial t'} - V\cdot\nabla'\alpha = -\frac{\hbar}{2\mu}(\nabla'\alpha)^2 + \frac{i\hbar}{2\mu}\nabla'^2\alpha$$

利用第一式可以把第二式简化为：

$$\frac{\partial\alpha}{\partial t'} = \frac{\mu V^2}{2\hbar}$$

联立求解本页的两个红色微分方程，可知：

$$\alpha(r', t') = \frac{\mu}{\hbar}\left(r'\cdot V + \frac{1}{2}V^2 t'\right) + c$$

忽略掉没有实际物理意义的实常数 c，波函数的伽利略变换法则为：

$$\Psi(r, t) = \exp\left[\frac{i\mu}{\hbar}\left(r'\cdot V + \frac{1}{2}V^2 t'\right)\right]\Psi'(r', t')$$

证毕.

非相对论性自由粒子薛定谔方程具有伽利略变换下的不变性．这个对称性有一重要的推论[1]：

1. **非相对论性量子力学无法描写基本粒子的产生、湮灭现象.**

下面给出此推论的论证思路. 粒子的产生与湮灭

$$\mu \quad \rightarrow \quad \mu_1 + \mu_2$$

意味着位置表象中体系的波函数可以经历如下自然演化：

$$\Psi_{\mu}(r,\ t) \quad \rightarrow \quad \Psi_{\mu_1\mu_2}(r_1,\ r_2,\ t)$$

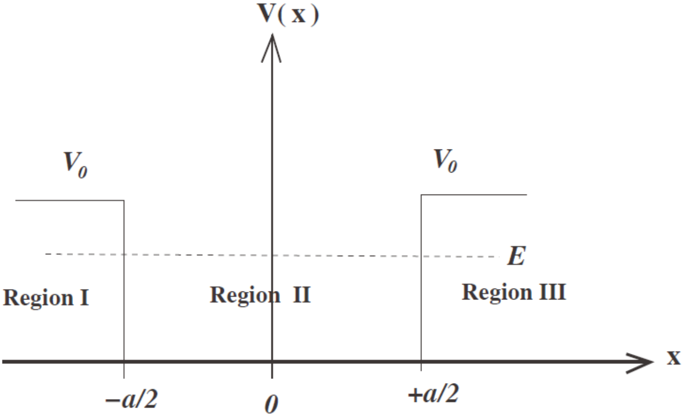
但上式无法摆脱对惯性系的依赖.

[1] 参见 E.M. Henley, Subatomic Physics, World Scientific Press, 2007, 3rd edition, Page7.

有限深方势阱

欲研究的体系由如下势能项定义：

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ V_0, & \text{elsewhere} \end{cases}$$



方势阱情形下的束缚态

方势阱的势能分布有两个间断点，$x = \pm a/2$. 定态薛定谔方程可以分区间表为：

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi^{(II)}(x)}{\mathrm{d}x^2} + k^2\psi^{(II)}(x) = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}, \quad x < \left|\frac{a}{2}\right|$$

与

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi^{(I,III)}(x)}{\mathrm{d}x^2} - \kappa^2\psi^{(I,III)}(x) = 0, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(V_0 - E)}, \quad x > \left|\frac{a}{2}\right|$$

- 因为 $V_{\text{Min}} = 0$，方势阱情形下定态薛定谔方程的束缚态若存在，能量本征值取值下限必为 $E \geqslant 0$ (i.e., $0 \leqslant E < V_0$). 所以，$k \geqslant 0$, $k \in \mathbb{R}_+$.
- $\psi^{(I,III)}(x)$ 的通解是 $\psi^{(I,III)}(x) = C\exp(\kappa x) + D\exp(-\kappa x)$. 参数 κ 的定义域已约定为 $\kappa > 0$. 为满足束缚态条件 $\psi(x)\big|_{x\to\pm\infty} = 0$，我们只能选择取：

$$\psi^{(I)}(x) = C\exp(\kappa x), \qquad \psi^{(III)}(x) = D\exp(-\kappa x)$$

- 在势能的间断点处,波函数的概率诠释允许施加定态波函数的连续性条件:

$$\psi^{(I)}(-a/2) = \psi^{(II)}(-a/2), \quad \psi^{(II)}(a/2) = \psi^{(III)}(a/2)$$

- 借用 Heaviside 阶梯函数 $\theta(s)$,可以把有限深方势阱的势能分布写作

$$V(x) = V_0\Big[\theta\,(x - a/2) + \theta\,(-x - a/2)\Big]$$

所以,此情形下的定态薛定谔方程可重新表为:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V_0\Big[\theta\,(x - a/2) + \theta\,(-x - a/2)\Big]\psi(x) = E\,\psi(x)$$

求此方程在势能间断点 $x = \pm\, a/2$ 无穷小邻域内关于 x 的积分,容易看到波函数一阶空间导数的连续性:

$$\left.\frac{\mathrm{d}\psi^{(I)}(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-a/2} = \left.\frac{\mathrm{d}\psi^{(II)}(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=-a/2}, \quad \left.\frac{\mathrm{d}\psi^{(II)}(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=a/2} = \left.\frac{\mathrm{d}\psi^{(III)}(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=a/2}$$

为了更有效地优化束缚态解的求解过程，我们再叙述一条定理：

- **一维量子力学体系的束缚态能量本征值都是不简并的.**

此定理证明如下．设 $\psi_1(x)$ 与 $\psi_2(x)$ 都是哈密顿算符

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)$$

属于能量本征值 E 的本征函数：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi_i(x)}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi_i(x) = E\psi_i(x), \qquad (i = 1,\ 2)$$

亦即，

$$\psi_1''(x) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[V(x) - E\right]\psi_1(x), \quad \psi_2''(x) = \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[V(x) - E\right]\psi_2(x)$$

所以：

$$0 = \psi_1(x)\psi_2''(x) - \psi_2(x)\psi_1''(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big[\psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x)\Big]$$

从而

$$\psi_1(x)\psi_2'(x)-\psi_2(x)\psi_1'(x)$$

是一个与 x 取值无关的常数，可以将其写为：

$$\psi_1(x)\psi_2'(x)-\psi_2(x)\psi_1'(x)=\Big[\psi_1(x)\psi_2'(x)-\psi_2(x)\psi_1'(x)\Big]\Big|_{x\to\infty}$$

但对于束缚态而言，$\psi_1(x)\big|_{x\to\infty}=\psi_2(x)\big|_{x\to\infty}=0$. 所以，

$$\psi_1(x)\psi_2'(x)-\psi_2(x)\psi_1'(x)=0$$

$$\rightsquigarrow\quad \frac{\psi_1'(x)}{\psi_1(x)}=\frac{\psi_2'(x)}{\psi_2(x)},\qquad \rightsquigarrow\quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln\left[\frac{\psi_2(x)}{\psi_1(x)}\right]=0$$

亦即：

$$\psi_2(x)=c\,\psi_1(x)$$

从波函数的概率诠释的意义上看，这两个能量本征函数是等价的，从而它们所属的能量本征值 E 不简并.

具体到目前关心的有限深方势阱问题，我们看到定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+V_0\Big[\theta\,(x-a/2)+\theta\,(-x-a/2)\,\Big]\psi(x)=E\,\psi(x)$$

具有空间反射变换 $x \rightsquigarrow -x$ 下的不变性

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi(-x)}{dx^2}+V_0\Big[\theta\,(x-a/2)+\theta\,(-x-a/2)\,\Big]\psi(-x)=E\,\psi(-x)$$

换言之，$\psi(x)$ 与 $\psi(-x)$ 都是体系属于能量本征值 E 的能量本征函数. 束缚态能量本征函数的非简并性意味着:

$$\psi(-x)=c\,\psi(x),\qquad \rightsquigarrow\ \psi(x)=c\,\psi(-x)=c^2\,\psi(x),\qquad \rightsquigarrow\ c^2=1$$

所以，$c=\pm 1$.

1. 这个分析表明**所考虑的有限深方势阱能量本征函数 $\psi(x)$ 或者具有偶宇称 $\psi(-x)=\psi(x)$，或者具有奇宇称 $\psi(-x)=-\psi(x)$.**

偶宇称束缚态解:

对于所考虑的有限深方势阱束缚态问题, 能量本征函数的一般解是:

$$\psi^{(I)}(x) = C\ \exp(\kappa x), \quad \psi^{(II)}(x) = A\ \cos(kx) + B\ \sin(kx),$$
$$\psi^{(III)}(x) = D\ \exp(-\kappa x).$$

偶宇称条件在此情形中表为:

$$\psi^{(III)}(x) = \psi^{(I)}(-x), \quad \psi^{(II)}(x) = \psi^{(II)}(-x)$$

所以, $B = 0$, $C = D$. 偶宇称的能量本征函数写为:

$$\psi^{(I)}(x) = C\ \exp(\kappa x), \quad \psi^{(II)}(x) = A\ \cos(kx),$$
$$\psi^{(III)}(x) = C\ \exp(-\kappa x).$$

势能间断点 $x = a/2$ 处波函数及其一阶空间导数的连续性条件是:

$$A\ \cos(ka/2) = C\ \exp(-\kappa a/2), \quad Ak\ \sin(ka/2) = C\kappa\ \exp(-\kappa a/2)$$

注意到 $\kappa = \sqrt{2\mu(V_0 - E)/\hbar^2}$ 和 $k = \sqrt{2\mu E/\hbar^2}$, 我们从以上连续性条件推得:

$$A = C\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 k^2}}\ \exp(-\kappa a/2), \qquad \boxed{\tan(ka/2) = \sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 k^2} - 1}}$$

- 除开一个无关紧要的归一化常数 C, 偶宇称的束缚态能量本征函数是:

$$\psi^{(I)}(x) = C\ \exp(\kappa x), \quad \psi^{(II)}(x) = C\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 k^2}}\ \exp(-\kappa a/2)\ \cos(kx),$$
$$\psi^{(III)}(x) = C\ \exp(-\kappa x).$$

- 因为 $\tan(ka/2) = \tan(ka/2 - p\pi)$, 此处 $p \in \mathbb{N}$. 偶宇称束缚态的能量本征值谱决定于如下代数方程:

$$\tan\left(ka/2 - p\pi\right) = \sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 k^2} - 1}$$

进一步把 p 看作是正实数 $ka/2\pi$ 中包含的最大非负整数,

$$\left[\frac{ka}{2\pi}\right] = p$$

即:

$$p \leqslant \frac{ka}{2\pi} < p+1, \qquad \rightsquigarrow \quad 0 \leqslant \left(\frac{ka}{2} - p\pi\right) < \pi$$

角度的正切函数仅在一、三象限取正值. 所以, 能量本征值的存在意味着 $(ka/2 - p\pi)$ 的定义域只能是第一象限:

$$0 \leqslant \left(\frac{ka}{2} - p\pi\right) < \frac{\pi}{2}, \qquad \rightsquigarrow \quad \boxed{p\pi \leqslant \frac{ka}{2} < \left(p + \frac{1}{2}\right)\pi}$$

进而, 能量本征值谱的定解方程可改写为:

$$\cos\left(ka/2 - p\pi\right) = \frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_0}} > 0$$

或者等价地，

$$\begin{aligned}\frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_0}} &= \cos\left(ka/2 - p\pi\right) \\ &= \sin\left[\frac{\pi}{2} - \left(\frac{ka}{2} - p\pi\right)\right] = \sin\left[\left(p + \frac{1}{2}\right)\pi - ka/2\right]\end{aligned}$$

所以，偶宇称态的能量本征值谱表达为：

$$\frac{ka}{2} = p\pi + \arccos\frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_0}} = \left(p + \frac{1}{2}\right)\pi - \arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_0}}$$

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

- 作为自洽性检验，不难看出偶宇称态能量本征值谱的确满足前页写出的不等式

$$p\pi \leqslant \frac{ka}{2} < \left(p + \frac{1}{2}\right)\pi$$

- 倘若 $\sqrt{2\mu V_0} \gg \hbar k$, 或者极端情形 $V_0 \to +\infty$, 粒子将被有效地束缚在方势阱内部. 偶宇称能量本征值谱决定于

$$\frac{ka}{2} = \left(p + \frac{1}{2}\right)\pi, \quad \rightsquigarrow \quad k = (2p+1)\frac{\pi}{a}, \quad p = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots$$

此情形下能量本征值谱可明确地表为:

$$E = \frac{k^2\hbar^2}{2\mu} \quad \rightsquigarrow \quad \boxed{E_p^{(\text{Even Parity})} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}(2p+1)^2, \quad p = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots}$$

归一化的偶宇称能量本征函数系是:

$$\psi_p^{(\text{Even Parity})}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left[(2p+1)\frac{\pi x}{a}\right]\theta(a/2 - x)\theta(x + a/2)$$

奇宇称束缚态解:

有限深方势阱束缚态情形下，奇宇称条件表为：

$$\psi^{(III)}(x) = -\psi^{(I)}(-x), \quad \psi^{(II)}(x) = -\psi^{(II)}(-x)$$

所以，奇宇称的能量本征函数写为：

$$\psi^{(I)}(x) = -C\,\exp(\kappa x), \quad \psi^{(II)}(x) = B\,\sin(kx),$$
$$\psi^{(III)}(x) = C\,\exp(-\kappa x).$$

势能间断点 $x = a/2$ 处波函数及其一阶空间导数的连续性条件是:

$$B\,\sin(ka/2) = C\,\exp(-\kappa a/2), \quad Bk\,\cos(ka/2) = -C\kappa\,\exp(-\kappa a/2)$$

从此连续性方程推论出：

$$B = C\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 k^2}}\exp(-\kappa a/2), \qquad \boxed{\cot(ka/2) = -\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 k^2} - 1}}$$

- 除开一个无关紧要的归一化常数 C, 奇宇称的束缚态能量本征函数是:

$$\psi^{(I)}(x) = -C\ \exp(\kappa x), \quad \psi^{(II)}(x) = C\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 k^2}}\exp(-\kappa a/2)\ \sin(kx),$$

$$\psi^{(III)}(x) = C\ \exp(-\kappa x).$$

- 因为 $\cot(ka/2) = \cot(ka/2 - p\pi)$, 此处 $p \in \mathbb{N}$. 奇宇称束缚态的能量本征值谱决定于如下代数方程:

$$\cot\left(\frac{ka}{2} - p\pi\right) = -\sqrt{\frac{2\mu V_0}{\hbar^2 k^2} - 1} < 0$$

进一步把 p 看作是正实数 $ka/2\pi$ 中包含的最大非负整数,

$$\left[\frac{ka}{2\pi}\right] = p$$

即:

$$p \leqslant \frac{ka}{2\pi} < p+1, \qquad \rightsquigarrow \quad 0 \leqslant \left(\frac{ka}{2} - p\pi\right) < \pi$$

角度的余切函数仅在二、四象限取负值. 所以, 能量本征值的存在意味着 $(ka/2-p\pi)$ 的定义域只能是第二象限:

$$\frac{\pi}{2}\leqslant\left(\frac{ka}{2}-p\pi\right)<\pi,\qquad\rightsquigarrow\qquad\boxed{\left(p+\frac{1}{2}\right)\pi\leqslant\frac{ka}{2}<(p+1)\,\pi}$$

进而, 能量本征值谱的定解方程可改写为[2]:

$$\begin{aligned}\frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_0}}&=\sin\left(\frac{ka}{2}-p\pi\right)\\&=\cos\left[\frac{ka}{2}-\left(p+\frac{1}{2}\right)\pi\right]=\sin\left[(p+1)\pi-\frac{ka}{2}\right]\end{aligned}$$

奇宇称态的能量本征值谱最终表达为:

$$\frac{ka}{2}=\left(p+\frac{1}{2}\right)\pi+\arccos\frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_0}}=(p+1)\,\pi-\arcsin\frac{\hbar k}{\sqrt{2\mu V_0}}$$

式中, $p=0,\ 1,\ 2,\ \cdots$.

[2] 注意: $\sin(\theta)=\sin(\pi-\theta)=\cos(\theta-\pi/2)$.

- 倘若 $\sqrt{2\mu V_0} \gg \hbar k$, 或者极端情形 $V_0 \to +\infty$, 奇宇称能量本征值谱决定于

$$\frac{ka}{2} = (p+1)\,\pi, \qquad \rightsquigarrow \quad k = 2(p+1)\frac{\pi}{a}, \qquad p = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots$$

此情形下能量本征值谱可明确地表为：

$$E = \frac{k^2\hbar^2}{2\mu} \qquad \rightsquigarrow \quad \boxed{E_p^{(\text{Odd Parity})} = \frac{2\pi^2\hbar^2}{\mu a^2}(p+1)^2, \qquad p = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots}$$

与偶宇称束缚态情形类似, 奇宇称束缚态下粒子也将被有效地束缚在方势阱内部. 归一化的奇宇称能量本征函数系是:

$$\psi_p^{(\text{Odd Parity})}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\ \sin\left[(p+1)\frac{2\pi x}{a}\right]\theta(a/2 - x)\theta(x + a/2)$$

方势阱情形下的非束缚态

倘若 $E > V_0 > 0$, 能量本征函数的一般解是:

$$\psi^{(I)}(x) = A\exp(i\tilde{\kappa}x) + B\exp(-i\tilde{\kappa}x), \quad \psi^{(II)}(x) = F\exp(ikx) + G\exp(-ikx),$$
$$\psi^{(III)}(x) = C\exp(i\tilde{\kappa}x) + D\exp(-i\tilde{\kappa}x).$$

式中,

$$\tilde{\kappa} = \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V_0)} > 0, \qquad k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} > 0$$

是两个正的实参数. 显然, 处于如此能量本征函数描写的量子态不可能是束缚态. 物理上最常见的非束缚态是所谓散射态.

- **设粒子从左侧入射, 能量本征函数的散射态特解是:**

$$\psi^{(I)}(x) = A\exp(i\tilde{\kappa}x) + B\exp(-i\tilde{\kappa}x), \psi^{(II)}(x) = F\exp(ikx) + G\exp(-ikx),$$
$$\psi^{(III)}(x) = C\exp(i\tilde{\kappa}x).$$

- 目前考虑的散射态是定态，此情形下的概率守恒定律为：

$$\frac{\mathrm{d}J(x)}{\mathrm{d}x} = 0, \qquad \rightsquigarrow \quad J^{(I)}(x) = J^{(III)}(x)$$

式中，

$$\begin{aligned} J^{(I)}(x) &= \frac{i\hbar}{2\mu}\left[\frac{\mathrm{d}\psi^{(I)*}(x)}{\mathrm{d}x}\psi^{(I)}(x) - \psi^{(I)*}(x)\frac{\mathrm{d}\psi^{(I)}(x)}{\mathrm{d}x}\right] \\ &= \frac{\hbar\tilde{\kappa}}{\mu}\left(|A|^2 - |B|^2\right), \\ J^{(III)}(x) &= \frac{i\hbar}{2\mu}\left[\frac{\mathrm{d}\psi^{(III)*}(x)}{\mathrm{d}x}\psi^{(III)}(x) - \psi^{(III)*}(x)\frac{\mathrm{d}\psi^{(III)}(x)}{\mathrm{d}x}\right] = \frac{\hbar\tilde{\kappa}}{\mu}|C|^2. \end{aligned}$$

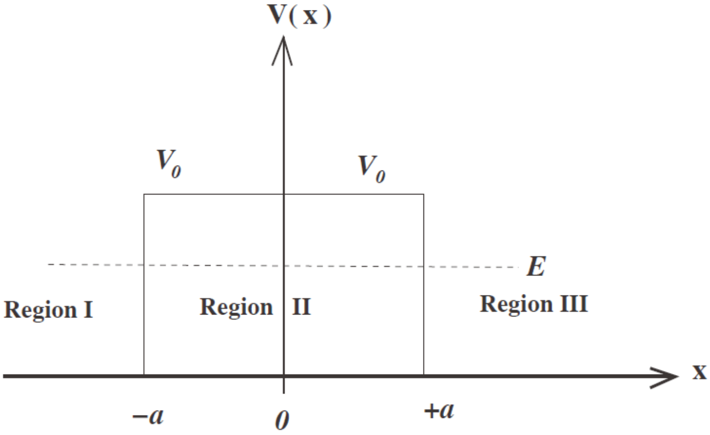
所以，定态散射问题中的概率守恒定律可表为：

$$\boxed{|B/A|^2 + |C/A|^2 = 1}$$

方势垒

欲研究的体系由如下势能项定义：

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & -a < x < a \\ 0, & \text{elsewhere} \end{cases}$$



方势垒问题中我们仅考虑 $V_0 > E > 0$ 的情形. 由于在 I、III 两区间(势垒外部)定态薛定谔方程是:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi^{(I,III)}(x)}{\mathrm{d}x^2} = E\,\psi^{(I,III)}(x), \qquad \rightsquigarrow \quad \frac{\mathrm{d}^2\psi^{(I,III)}(x)}{\mathrm{d}x^2} + k^2\,\psi^{(I,III)}(x) = 0$$

式中 $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar > 0$，我们看到:

$$\psi^{(I)}(x)\Big|_{x\to-\infty} \sim \exp(\pm ikx), \qquad \psi^{(III)}(x)\Big|_{x\to+\infty} \sim \exp(\pm ikx).$$

所以,方势垒问题中定态薛定谔方程没有束缚态解,只有散射解:

$$\psi^{(I)}(x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx),$$
$$\psi^{(III)}(x) = C\exp(ikx) + D\exp(-ikx)$$

- 定态散射过程中的概率守恒定律 $\mathrm{d}J(x)/\mathrm{d}x = 0$ 要求:

$$|A|^2 - |B|^2 = |C|^2 - |D|^2, \qquad \rightsquigarrow \quad |A|^2 + |D|^2 = |B|^2 + |C|^2$$

概率守恒定律意味着区间 I 中波函数的系数 $(A,\ B)$ 与区间 III 中波函数的系数 $(C,\ D)$ 之间存在线性变换.

为了找到这个线性变换,我们写出区间 II 中定态薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi^{(II)}(x)}{\mathrm{d}x^2}+V_0\,\psi^{(II)}(x)=E\,\psi^{(II)}(x)$$

的一般解:

$$\psi^{(II)}(x)=F\exp(\kappa x)+G\exp(-\kappa x),\qquad \kappa=\sqrt{\frac{2\mu(V_0-E)}{\hbar^2}}>0$$

如此,波函数及其一阶导数在 $x=-a$ 处的连续性条件写为:

$$A\,e^{-ika}+B\,e^{ika}=F\,e^{-\kappa a}+G\,e^{\kappa a},\quad A\,e^{-ika}-B\,e^{ika}=-\frac{i\kappa}{k}(F\,e^{-\kappa a}-G\,e^{\kappa a})$$

亦即,

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}=\frac{1}{2}\begin{pmatrix} (1-\frac{i\kappa}{k})e^{-\kappa a+ika} & (1+\frac{i\kappa}{k})e^{\kappa a+ika} \\ (1+\frac{i\kappa}{k})e^{-\kappa a-ika} & (1-\frac{i\kappa}{k})e^{\kappa a-ika} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix}$$

类似地,波函数及其一阶导数在 $x = a$ 处的连续性意味着:

$$F\,e^{\kappa a} + G\,e^{-\kappa a} = C\,e^{ika} + D\,e^{-ika}, \quad F\,e^{\kappa a} - G\,e^{-\kappa a} = \frac{ik}{\kappa}(C\,e^{ika} - D\,e^{-ika})$$

亦即,

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} (1+\frac{ik}{\kappa})e^{-\kappa a+ika} & (1-\frac{ik}{\kappa})e^{-\kappa a-ika} \\ (1-\frac{ik}{\kappa})e^{\kappa a+ika} & (1+\frac{ik}{\kappa})e^{\kappa a-ika} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

结合以上两种边界条件,我们有:

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}$$

式中,

$$M_{11} = \left[\cosh(2\kappa a) + \frac{i\epsilon}{2}\sinh(2\kappa a)\right]\exp(2ika), \quad M_{12} = \frac{i\eta}{2}\sinh(2\kappa a),$$

$$M_{21} = -\frac{i\eta}{2}\sinh(2\kappa a), \quad M_{22} = \left[\cosh(2\kappa a) - \frac{i\epsilon}{2}\sinh(2\kappa a)\right]\exp(-2ika)$$

矩阵元 M_{ij} 中出现的两个实参数 ϵ、η 定义为:

$$\epsilon = \frac{\kappa}{k} - \frac{k}{\kappa}, \qquad \eta = \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa}.$$

- 不难看到矩阵 M 具有性质:

$$M_{11}^* = M_{22}, \quad M_{12}^* = M_{21}, \quad \det M = 1$$

- 倘若 $D = 0$,

$$A = M_{11} C, \qquad B = M_{21} C$$

  方势垒问题对应的散射图像是:

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \ \exp(ikx) + B \exp(-ikx), & x < -a \\ C \ \exp(ikx), & x > a \end{cases}$$

  即粒子从左侧入射到方势垒上, 以一定的概率幅从势垒上反射、以另外的概率幅透射过势垒.

对此简单散射问题的有效描写是定义反射系数 $\mathscr{R}$ 与透射系数 $\mathscr{T}$:

$$\mathscr{R}=\frac{|B|^2}{|A|^2}=\frac{|M_{21}|^2}{|M_{11}|^2},\qquad \mathscr{T}=\frac{|C|^2}{|A|^2}=\frac{1}{|M_{11}|^2}.$$

因此,

$$\mathscr{R}=\frac{\eta^2\sinh^2(2\kappa a)}{4\cosh^2(2\kappa a)+\epsilon^2\sinh^2(2\kappa a)},\quad \mathscr{T}=\frac{4}{4\cosh^2(2\kappa a)+\epsilon^2\sinh^2(2\kappa a)}$$

概率守恒定律在此情形下表达为:

$$\mathscr{R}+\mathscr{T}=1$$

- 一般情形下透射系数 $\mathscr{T}\neq 0$, 这个结果是经典力学无法理解的, 是量子力学中著名的势垒隧穿效应. 倘若势垒既宽又高, $\kappa a\gg 1$,

  $$\cosh(2\kappa a)\approx\sinh(2\kappa a)\approx\frac{1}{2}\exp(2\kappa a)$$

  所以,

  $$\mathscr{T}\approx 16\left(\frac{k\kappa}{k+\kappa}\right)^2\exp(-4\kappa a)$$

一维定态散射问题的形式理论

在方势垒问题中，势能项可以等价地表为：

$$V(x) = V_0\theta(a-x)\theta(a+x)$$

定态薛定谔方程

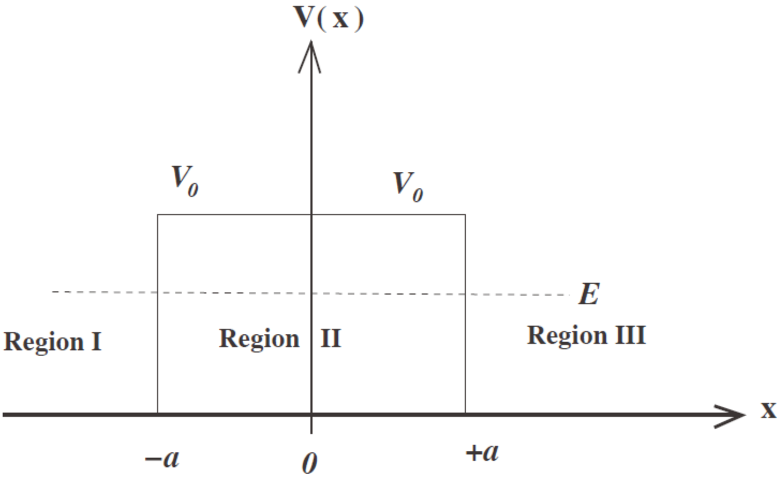
$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} + V_0\theta(a-x)\theta(a+x)\psi(x) = E\,\psi(x)}$$

在 $x<-a$, $-a<x<a$ 与 $x>a$ 三个区间的一般解是：

$$\begin{aligned}
\psi^{(I)}(x) &= A\ \exp(ikx) + B\ \exp(-ikx), && x<-a.\\
\psi^{(II)}(x) &= F\ \exp(\kappa x) + G\ \exp(-\kappa x), && -a<x<a.\\
\psi^{(III)}(x) &= C\ \exp(ikx) + D\ \exp(-ikx), && x>a.
\end{aligned}$$

式中，

$$k = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} > 0, \qquad \kappa = \sqrt{\frac{2\mu(V_0-E)}{\hbar^2}} > 0$$


V(x)
V_0
V_0
E
Region I
Region II
Region III
x
−a
0
+a

- 在方势垒的定态散射问题中，我们常假设势垒一侧（例如区间 III）的量子态已知. 如此，势垒另一侧的量子态系数 (A, B) 可通过线性变换与已知量子态的系数 (C, D) 联系起来：

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}, \quad M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}$$

- 或者，从势垒出射的波（outgoing）的系数 (B, C) 可通过线性变换与入射波（incoming）的系数 (A, D) 联系起来：

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$$

- 线性变换 M 或者 S 完全包含了所有的定态散射信息. 例如在 $D = 0$ 情形下，

$$\mathscr{T} = \frac{1}{|M_{11}|^2} = |S_{21}|^2$$

那么，如何确定 M 矩阵或者 S 矩阵？ 简单的散射问题中，某些矩阵元可通过势能间断点处波函数及其一阶空间导数的连续性条件确定.

- S 矩阵称为散射矩阵. 根据概率守恒定律, 我们有:

$$\begin{pmatrix} B^* & C^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = |B|^2 + |C|^2 = |A|^2 + |D|^2 = \begin{pmatrix} A^* & D^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

另一方面, 按照 S 矩阵的定义式, 我们有:

$$\begin{pmatrix} B^* & C^* \end{pmatrix}\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^* & D^* \end{pmatrix} S^\dagger S \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

比较以上二式即知:

$$S^\dagger S = I$$

所以, 散射矩阵是幺正矩阵[3]. 2×2 的幺正矩阵包含 $2^2 = 4$ 个实参数. S 矩阵可以一般性地写作:

$$S = \begin{pmatrix} u\exp(i\alpha) & i\sqrt{1-u^2}\exp(i\beta) \\ i\sqrt{1-u^2}\exp[i(\alpha-\beta+\gamma)] & u\exp(i\gamma) \end{pmatrix}$$

其行列式为 $\det S = \exp[i(\alpha+\gamma)]$, $\rightsquigarrow$ $\left|\det S\right| = 1$.

[3]通常认为矩阵 S 是有逆矩阵的.

- M 矩阵与 S 矩阵不是独立的. 按照 S 矩阵的定义, 势垒出射波的系数 B 与 C 表为:

$$B = S_{11}A + S_{12}D, \quad C = S_{21}A + S_{22}D$$

反解此方程组, 把势垒左侧波函数的系数 A、B 用右侧波函数的系数 C、D 表达出来, 即有

$$A = \frac{1}{S_{21}}C - \frac{S_{22}}{S_{21}}D, \quad B = \frac{S_{11}}{S_{21}}C - \frac{\det S}{S_{21}}D$$

由于 S 是幺正矩阵,

$$S_{11}^* = \frac{S_{22}}{\det S}, \quad S_{12}^* = -\frac{S_{21}}{\det S}, \quad S_{21}^* = -\frac{S_{12}}{\det S}, \quad S_{22}^* = \frac{S_{11}}{\det S}$$

所以, 系数 B 的表达式可改写为:

$$B = \frac{S_{11}}{S_{21}}C + \frac{1}{S_{12}^*}D$$

把本页的两个蓝色方程与 M 矩阵的定义式做比较, 即知:

$$M_{11} = \frac{1}{S_{21}}, \quad M_{12} = -\frac{S_{22}}{S_{21}}, \quad M_{21} = \frac{S_{11}}{S_{21}}, \quad M_{22} = \frac{1}{S_{12}^*}.$$

对称性对 S 矩阵的制约

- 方势垒问题中，能量本征值 E 明显是简并的. 倘若,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+V_0\theta(a-x)\theta(a+x)\psi(x)=E\psi(x)$$

则必有:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi^*(x)}{\mathrm{d}x^2}+V_0\theta(a-x)\theta(a+x)\psi^*(x)=E\psi^*(x)$$

即 $\psi(x)$ 与 $\psi^*(x)$ 是定态薛定谔方程属于同一能量本征值 E 的本征函数.

$\psi(x)$ 在势垒外部区间的一般解是:

$$\psi^{(I)}(x)=A\ \exp(ikx)+B\ \exp(-ikx),\qquad x<-a.$$
$$\psi^{(III)}(x)=C\ \exp(ikx)+D\ \exp(-ikx),\qquad x>a.$$

在 $\psi(x)$ 中,

1. $A\exp(ikx)$ 与 $D\exp(-ikx)$ 是势垒的入射波.
2. $B\exp(-ikx)$ 与 $C\exp(ikx)$ 是势垒的出射波.

所以，

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}, \quad S^{\dagger} = S^{-1}.$$

但是，$\psi^*(x)$ 在势垒外部区间的一般解是：

$$\begin{aligned} \left[\psi^{(I)}(x)\right]^* &= A^* \ \exp(-ikx) + B^* \ \exp(ikx), && x < -a. \\ \left[\psi^{(III)}(x)\right]^* &= C^* \ \exp(-ikx) + D^* \ \exp(ikx), && x > a. \end{aligned}$$

在 $\psi^*(x)$ 中，

1. $B^* \exp(ikx)$ 与 $C^* \exp(-ikx)$ 是势垒的入射波.
2. $A^* \exp(-ikx)$ 与 $D^* \exp(ikx)$ 是势垒的出射波.

所以，

$$\begin{pmatrix} A^* \\ D^* \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} B^* \\ C^* \end{pmatrix} \quad \rightsquigarrow \quad \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = S^T \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

以上诸式中的 S 是同一个散射矩阵. 比较以上二蓝色方程，可知 S 矩阵是对称矩阵 $S^T = S$. $\rightsquigarrow$ $S_{12} = S_{21}$.

- 此外，本节所考虑的方势垒问题还存在着空间反演对称性. 倘若，

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2}+V_0\theta(a-x)\theta(a+x)\psi(x)=E\psi(x)$$

则必有：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi(-x)}{\mathrm{d}x^2}+V_0\theta(a-x)\theta(a+x)\psi(-x)=E\psi(-x)$$

即 $\psi(x)$ 与 $\psi(-x)$ 是定态薛定谔方程属于同一能量本征值 E 的本征函数.

$\psi(x)$ 在势垒外部区间的一般解是：

$$\psi^{(I)}(x)=A\ \exp(ikx)+B\ \exp(-ikx),\qquad x<-a.$$

$$\psi^{(III)}(x)=C\ \exp(ikx)+D\ \exp(-ikx),\qquad x>a.$$

因此，$\psi(-x)$ 在势垒外部区间的一般解是：

$$\psi^{(III)}(-x)=C\ \exp(-ikx)+D\ \exp(ikx),\qquad x<-a.$$

$$\psi^{(I)}(-x)=A\ \exp(-ikx)+B\ \exp(ikx),\qquad x>a.$$

在 $\psi(x)$ 中，

1. $A\exp(ikx)$ 与 $D\exp(-ikx)$ 是势垒的入射波.
2. $B\exp(-ikx)$ 与 $C\exp(ikx)$ 是势垒的出射波.

所以，

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = S\begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

但在 $\psi(-x)$ 中，

1. $D\exp(ikx)$ 与 $A\exp(-ikx)$ 是势垒的入射波.
2. $C\exp(-ikx)$ 与 $B\exp(ikx)$ 是势垒的出射波.

所以，

$$\begin{pmatrix} C \\ B \end{pmatrix} = S\begin{pmatrix} D \\ A \end{pmatrix}, \quad \rightsquigarrow \quad \begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{22} & S_{21} \\ S_{12} & S_{11} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

比较本页的两个蓝色方程，可知：$S_{11} = S_{22}$, $S_{12} = S_{21}$. 此对称性允许我们把 S 矩阵确定到仅含两个依赖于物理资料的实参数：

$$S = \begin{pmatrix} u & i\sqrt{1-u^2} \\ i\sqrt{1-u^2} & u \end{pmatrix}\exp(i\beta)$$

戴尔塔函数势阱

现在欲考虑的体系是:质量为 μ 的微观粒子在一个由狄拉克 δ-函数表征的窄势阱中运动,

$$V(x) = -g\,\delta(x)$$

式中约定耦合常数 $g > 0$. 显然, $[g]$ = 能量 $\times$ 长度.

1. 回忆经典力学给出的氢原子势能公式(高斯单位制)

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \quad \rightsquigarrow \quad [e^2] = \text{能量} \times \text{长度}$$

倘若 $g = e^2$, 则 δ-势阱表征的玩具模型可视为一维氢原子.

能量本征值方程是:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} - g\,\delta(x)\psi(x) = E\,\psi(x)$$

坐标原点 $x=0$ 是势能 $V(x) = -g\,\delta(x)$ 的奇异点.

1. 尽管如此,波函数的概率诠释允许我们仍然假定波函数、例如能量本征函数 $\psi(x)$ 在 $x=0$ 点连续

$$\psi(0) = \psi(0^+) = \psi(0^-)$$

并取有限值.

2. 但我们没有理由假定波函数的一阶空间导数 $\psi'(x)$ 也在 $x=0$ 点连续. 事实上,求定态薛定谔方程在 $x=0$ 邻域中对坐标 x 的定积分并注意到

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} E\psi(x)dx \approx 2\epsilon E\,\psi(0) \approx 0$$

我们有:

$$\left[\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right]_{x=\epsilon} - \left[\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right]_{x=-\epsilon} + \frac{2\mu g}{\hbar^2}\,\psi(0) = 0$$

戴尔塔势阱束缚态

在离开坐标原点的地点，$x \neq 0$，定态薛定谔方程退化为：

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} = E\psi(x) \qquad \rightsquigarrow \qquad \psi''(x) + \frac{2\mu E}{\hbar^2}\psi(x) = 0$$

存在束缚态使得 $\psi(x)\big|_{x\to\pm\infty} = 0$ 的必要条件是 $E < 0$. 此情形下定态薛定谔方程可改写为

$$\psi''(x) - \kappa^2\,\psi(x) = 0, \qquad \kappa := \sqrt{-\frac{2\mu E}{\hbar^2}} > 0$$

其满足束缚态边界条件的一般解是：

$$\psi(x) = A\,\theta(x)\exp(-\kappa x) + B\,\theta(-x)\exp(\kappa x)$$

施加 $x = 0$ 点波函数的连续性和波函数一阶导数的跃变条件，

$$A = B, \qquad -\kappa(A+B) + \frac{2\mu g}{\hbar^2}A = 0$$

所以，

$$B = A, \qquad \kappa = \frac{\mu g}{\hbar^2}$$

换言之，$E<0$ 情形下 δ 势阱中的确存在着一个束缚态．粒子的能量本征值是：[4]

$$E = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\kappa^2 = -\frac{\mu g^2}{2\hbar^2}$$

相应的能量本征函数为：

$$\psi(x) = A\,\theta(x)\exp(-\kappa x) + A\,\theta(-x)\exp(\kappa x)$$

1. $\psi(x)$ 具有偶宇称，$\psi(x) = \psi(-x)$.
2. 常数 A 可视为波函数的归一化常数．因此，

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 2|A|^2 \int_0^{\infty} \exp(-2\kappa x) dx = \frac{|A|^2}{\kappa}, \quad \rightsquigarrow \quad A = \sqrt{\kappa}$$

[4] 倘若 $g = e^2$，此能量本征值恰为玻尔氢原子能级公式中的基态能量.

戴尔塔势阱散射态

倘若 $E > 0$, 则定态薛定谔方程在离开坐标原点的地点 $(x \neq 0)$ 表达为:

$$\psi''(x) + k^2\,\psi(x) = 0, \qquad k := \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}} > 0$$

此情形下束缚态条件 $\psi(x)\big|_{x\to\pm\infty} = 0$ 不可能满足. 定态薛定谔方程允许存在散射态解:

$$\psi(x) = \theta(-x)\Big[A\ \exp(ikx) + B\ \exp(-ikx)\Big] + \theta(x)\Big[C\ \exp(ikx)\Big]$$

1. 概率守恒定律意味着:

$$|A|^2 - |B|^2 = |C|^2$$

施加 $x = 0$ 点波函数的连续性和波函数一阶导数的跃变条件:

$$A + B = C, \qquad ik(C - A + B) + \frac{2\mu g}{\hbar^2}\,C = 0$$

解之得:

$$\frac{B}{A}=i\frac{\mu g}{k\hbar^2}\left[1-i\frac{\mu g}{k\hbar^2}\right]^{-1},\qquad \frac{C}{A}=\left[1-i\frac{\mu g}{k\hbar^2}\right]^{-1}.$$

δ-势阱的反射系数与透射系数分别为:

$$\mathscr{R}:=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\left(\frac{\mu g}{k\hbar^2}\right)^2\left[1+\left(\frac{\mu g}{k\hbar^2}\right)^2\right]^{-1}=\frac{\mu g^2}{2E\hbar^2+\mu g^2}$$

$$\mathscr{T}:=\left|\frac{C}{A}\right|^2=\left[1+\left(\frac{\mu g}{k\hbar^2}\right)^2\right]^{-1}=\frac{2E\hbar^2}{2E\hbar^2+\mu g^2}$$

显然, $\mathscr{R}+\mathscr{T}=1$.

观察以上反射、透射系数, 我们看到:

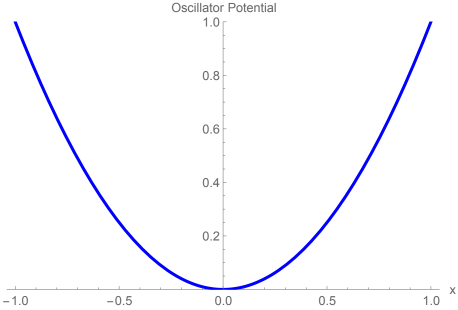
1. 在 $E>0$ 情形下, 无论 E 多么小, 粒子总有一定的概率透射过 δ-势阱.
2. 只要 E 的取值不是趋于无穷大, 粒子总有一定的概率被 δ-势阱反射.

简谐振子

欲研究的量子力学体系由如下势能分布描写：

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \qquad -\infty < x < +\infty$$

当简谐振子处在束缚态时，其能量本征值 E 的取值范围是 $0 \leqslant E < \infty$.



简谐振子量子态的定态 Schrödinger 方程是:

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

它正是振子的能量本征值方程. 为简洁起见, 我们把它重新表达为:

$$0 = -\frac{E}{\hbar\omega/2}\,\psi + \frac{m\omega}{\hbar}x^2\,\psi - \frac{\hbar}{m\omega}\,\psi''$$

可以引入两个无量纲的参数 ξ 和 λ,

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x, \qquad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

把简谐振子的能量本征方程改写为:

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

下面的任务演变成在束缚态条件下求解此方程. $\xi=\pm\infty$ 是谐振子的能量本征值方程

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

的非正则奇点. 为了得到束缚态解, 需要分析方程在 $\xi\to\pm\infty$ 处的渐近行为. 首先注意到方程可以等价地写作:

$$\left[\frac{d}{d\xi}-\xi\right]\left[\frac{d}{d\xi}+\xi\right]\psi(\xi)+(\lambda-1)\psi(\xi)=0$$

当 $\xi\to\pm\infty$ 时, 此方程左端的最后一项 $(\lambda-1)\psi$ 可以忽略. 如此, 在 $\xi\to\pm\infty$ 区域内,

$$\left[\frac{d}{d\xi}+\xi\right]\psi(\xi)\approx 0 \qquad \rightsquigarrow \qquad \psi(\xi)\approx e^{-\xi^2/2}$$

这一渐近解符合束缚态条件.

不妨设简谐振子能量本征值方程符合束缚态条件的严格解具有形式:

$$\psi(x) = e^{-\xi^2/2}\, u(\xi)$$

由此,谐振子的能量本征值方程转换为待定函数 $u(\xi)$ 服从数学物理中著名的厄米方程:

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

$\xi = 0$ 点是厄米方程的常点. 可以在其邻域内求方程的幂级数解:

$$u(\xi) = \sum_{k=0}^{+\infty} c_k\, \xi^k, \qquad |\xi| < \infty$$

系数 c_k 满足递推关系:

$$c_{k+2} = \frac{2k - \lambda + 1}{(k+1)(k+2)}\, c_k, \qquad k = 0,\ 1,\ 2\ \cdots$$

显然,所有偶次幂项的系数都可以表示为 c_0 的倍数,而所有奇次幂项的系数都可以表示为 c_1 的倍数.

令 $\lambda=2n+1$, 则有:

$$c_{2k}=(-2)^k\frac{n(n-2)\cdots(n-2k+4)(n-2k+2)}{(2k)!}c_0$$

$$c_{2k+1}=(-2)^k\frac{(n-1)(n-3)\cdots(n-2k+3)(n-2k+1)}{(2k+1)!}c_1$$

式中 $k=1,\ 2,\ 3,\cdots$. 把 c_0 和 c_1 作为两个任意常数, 从而求得厄米方程的两个线性无关的级数解是:

$$u_1(\xi)=\sum_{k=0}^{+\infty}c_{2k}\xi^{2k},\qquad u_2(\xi)=\sum_{k=0}^{+\infty}c_{2k+1}\xi^{2k+1}$$

现在考察所得级数解的收敛性. 解在 $\xi\to\infty$ 区域中的渐近行为取决于 $k\to+\infty$ 的项的贡献. $k\to+\infty$ 时, $c_{k+2}/c_k\sim 2/k$. 对于 $k=2m$(偶数)的情形, $c_{2m+2}/c_{2m}\approx 1/m$, 所以,

$$u_1(\xi)\Big|_{\xi\to\infty}\approx\sum_{m=M}^{\infty}\frac{\xi^{2m}}{m!}\sim e^{\xi^2}$$

同理,

$$u_2(\xi)\Big|_{\xi\to\infty} \approx \xi\ e^{\xi^2}$$

用这样的无穷级数解构造的谐振子波函数,

$$\psi(x) = e^{-\xi^2/2}\ u(\xi)\ \sim\ e^{\xi^2/2}$$

显然不满足束缚态波函数在无穷远处应该满足的边界条件.

为了得到物理上可以接受的波函数, $u_1(\xi)$ 和 $u_2(\xi)$ 两个无穷级数解中至少有一个须中断为多项式. 从级数解系数的表达式可知, 此情形只有在参数 n 取非负整数时才能实现. 所以, 处于束缚态的简谐振子的能级是量子化的:

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

当 n 为偶数时, $u_1(\xi)$ 中断为多项式. 当 n 为奇数时, $u_2(\xi)$ 中断为多项式. 这些多项式称为厄米多项式, 习惯上规定多项式的最高幂次项的系数为 $c_n = 2^n$.

厄米多项式:

不难证明,厄米多项式 $H_n(\xi)$ 有如下的母函数公式:

$$e^{-s^2+2\xi s} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n$$

按此公式,

$$\begin{aligned} H_n(\xi) &= \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-s^2+2\xi s}\bigg|_{s=0} = \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(\xi-s)^2+\xi^2}\bigg|_{s=0} = e^{\xi^2} \frac{\partial^n e^{-(\xi-s)^2}}{\partial s^n}\bigg|_{s=0} \\ &= (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n e^{-(\xi-s)^2}}{\partial \xi^n}\bigg|_{s=0} \\ &= (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n e^{-\xi^2}}{\partial \xi^n} \end{aligned}$$

此式正是厄米多项式的统一表达式. 它的几个特例是:

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2, \quad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$$

利用母函数公式计算积分

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2+2\xi s} e^{-t^2+2\xi t} e^{-\xi^2} d\xi = \sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^m t^n}{m!n!} \int_{-\infty}^{+\infty} H_m(\xi) H_n(\xi) e^{-\xi^2} d\xi$$

可以得到厄米多项式服从的正交归一关系. 显然, 上式左端的积分不难完成:

$$\begin{aligned} \text{LHS} &= e^{-s^2-t^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, e^{-\xi^2+2(s+t)\xi} = e^{2st} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi\, e^{-[\xi-(s+t)]^2} \\ &= \sqrt{\pi} e^{2st} = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n s^n t^n}{n!} \end{aligned}$$

比较两端知:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_m(\xi) H_n(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} 2^n \cdot n!\, \delta_{mn}$$

这就是厄米多项式的正交性公式.

以此为依托可证，简谐振子的正交归一的能量本征函数是：

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n \cdot n!}}\, e^{-\alpha^2 x^2/2}\, H_n(\alpha x), \quad n = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

其中的参数 $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ 具有长度倒数的量纲. 波函数的正交归一条件表为：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi_m(x)\, \psi_n(x) = \delta_{mn}$$

点评：

1. $\psi_n(x)$ 是哈密顿算符属于本征值 $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ 的本征函数，不简并.

2. 由于谐振子势能具有空间反射对称性，$\psi_n(x)$ 必有确定的宇称. 事实上，

$$\psi_n(-x) = (-1)^n\, \psi_n(x)$$

简谐振子的基态:

1. 简谐振子的基态能量是:

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \neq 0$$

称为零点能 (zero-point energy). 基态能量不为零是微观简谐振子具有波动性的表现.

2. 简谐振子的基态波函数是:

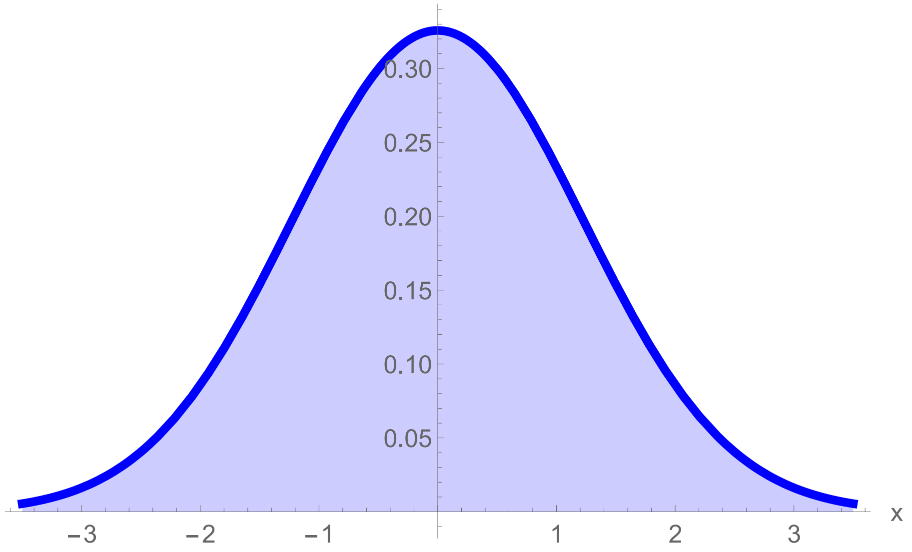
$$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}}\, e^{-\alpha^2x^2/2}$$

3. 处于基态的谐振子在空间的概率分布为:

$$\rho_0(x) = |\psi_0(x)|^2 = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2x^2}$$

这是一个高斯分布, 在坐标原点 $(x=0)$ 处找到粒子的概率最大.

$$|\psi_0(x,0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{3\pi}} e^{-x^2/3}$$



$\alpha^{-1} = \sqrt{\hbar/m\omega}$ 是谐振子的特征长度:

1. 当 $x = \pm\alpha^{-1}$ 时,

$$V(x)\Big|_{x=\pm 1/\alpha} = \frac{m\omega^2}{2\alpha^2} = \hbar\omega/2 = E_0$$

2. 倘若按照 Newton 力学的观点, $|x| > \alpha^{-1}$ 是经典禁区, 基态谐振子只允许在 $|x| \leqslant \alpha^{-1}$ 的区间内运动.

3. 按照量子力学中波函数的概率诠释, 简谐振子仍有一定的概率处在经典禁区, 相应的概率为:

$$P = 2\int_{\alpha^{-1}}^{+\infty} dx\, |\psi_0(x)|^2 = \frac{2\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{\alpha^{-1}}^{+\infty} dx\, e^{-\alpha^2 x^2} \approx 0.157$$

这一结果反映的仍是微观简谐振子的波动性.

简谐振子能量本征值问题的狄拉克解法:

一维量子力学简谐振子由如下 Hamilton 算符定义,

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

其本征值方程

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

既可以在选定表象后求解[5], 也可以不选定表象、纯粹使用算符满足的对易关系进行代数求解.

狄拉克代数解法的要点是设法将 $\hat{H}$ 做因式分解:

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= \frac{1}{2}\left[\frac{\hat{p}^2}{m\hbar\omega} + \frac{m\omega\hat{x}^2}{\hbar}\right]\hbar\omega \\
&= \frac{1}{2}\left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} + i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right]\left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} - i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right]\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega
\end{aligned}$$

[5]前面我们选择了位置表象, 把此本征值方程约化成为了一个二阶常微分方程.

引入两个新的、无量纲的线性算符：

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}}-i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right],\qquad \hat{a}^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}}+i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right]$$

显然，$\hat{a}$ 与 $\hat{a}^{\dagger}$ 均不是厄米算符，但它们互为厄米共轭算符．二者的对易关系为：

$$\begin{aligned}\left[\hat{a},\ \hat{a}^{\dagger}\right] &= \frac{1}{2}\left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}}-i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x},\ \ \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}}+i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right]\\ &= \frac{i}{\hbar}[\hat{p},\ \hat{x}]\\ &= \hat{I}\end{aligned}$$

完整的对易关系集合是：

$$\left[\hat{a},\ \hat{a}^{\dagger}\right]=\hat{I},\quad \left[\hat{a},\ \hat{a}\right]=\left[\hat{a}^{\dagger},\ \hat{a}^{\dagger}\right]=0$$

利用 $\hat{a}$ 与 $\hat{a}^{\dagger}$，简谐振子的哈密顿算符可重新表为：

$$\hat{H}=\left[\hat{a}^{\dagger}\hat{a}+\frac{1}{2}\right]\hbar\omega=\left[\hat{N}+\frac{1}{2}\right]\hbar\omega$$

式中,

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$$

点评:

1. $\hat{N}$ 是厄米算符, $\hat{N}^\dagger = \hat{N}$.
2. $[\hat{N},\ \hat{H}] = 0$. 因此, $\hat{N}$ 与哈密顿算符 $\hat{H}$ 具有共同的本征态矢量.
3. $\hat{N}$ 与 $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ 的对易关系为[6]:

$$[\hat{N},\ \hat{a}] = -\hat{a}, \qquad [\hat{N},\ \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$$

4. 若右矢 $|n\rangle$ 为厄米算符 $\hat{N}$ 属于本征值 n 的归一化本征态矢,
$\hat{N}|n\rangle = n\,|n\rangle$, $\langle n|n\rangle = 1$, 则不难看到:

$$n = n\langle n|n\rangle = \langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \Big|\hat{a}\,|n\rangle\Big|^2, \qquad \rightsquigarrow \quad n \geqslant 0$$

---

[6] 请各位自行检验.

那么，算符 $\hat{N}$ 以及 $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$ 各自有什么物理意义呢？

对易关系 $[\hat{N},\ \hat{a}] = -\hat{a}$ 与 $[\hat{N},\ \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$ 告诉我们：若 $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$，则有：

$$\begin{aligned}
\hat{N}\,\hat{a}\,|n\rangle &= [\hat{N},\ \hat{a}]\,|n\rangle + \hat{a}\hat{N}|n\rangle \\
&= -\hat{a}\,|n\rangle + \hat{a}n\,|n\rangle \\
&= (n-1)\,\hat{a}\,|n\rangle \\
\hat{N}\,\hat{a}^\dagger\,|n\rangle &= [\hat{N},\ \hat{a}^\dagger]\,|n\rangle + \hat{a}^\dagger\hat{N}|n\rangle \\
&= \hat{a}^\dagger\,|n\rangle + \hat{a}^\dagger n\,|n\rangle \\
&= (n+1)\,\hat{a}^\dagger\,|n\rangle
\end{aligned}$$

一维量子力学体系的束缚态能级不简并. 所以，以上两式的成立意味着：

$$\hat{a}\,|n\rangle = \lambda(n)\,|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \nu(n)\,|n+1\rangle$$

换言之，$\hat{a}$ 是算符 $\hat{N}$ 本征值的降算符，而 $\hat{a}^\dagger$ 是算符 $\hat{N}$ 本征值的升算符.

系数 $\lambda(n)$ 与 $\nu(n)$ 可用如下方法确定. 设 $\hat{N}$ 的本征态矢均满足归一化条件, 如此即有:

$$\begin{aligned}
\left|\lambda(n)\right|^2 &= \Big[\lambda(n)^* \langle n-1|\Big] \cdot \Big[\lambda(n) |n-1\rangle\Big] \\
&= \langle n|\hat{a}^\dagger a|n\rangle \\
&= \langle n|\hat{N}|n\rangle \\
&= n \qquad\qquad \rightsquigarrow \quad \lambda(n) = \sqrt{n}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\left|\nu(n)\right|^2 &= \Big[\nu(n)^* \langle n+1|\Big] \cdot \Big[\nu(n) |n+1\rangle\Big] \\
&= \langle n|a\hat{a}^\dagger|n\rangle \\
&= \langle n|(\hat{N}+\hat{I})|n\rangle \\
&= n+1 \qquad\qquad \rightsquigarrow \quad \nu(n) = \sqrt{n+1}
\end{aligned}$$

所以,

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle, \quad \hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

$\hat{a}$ 作为厄米算符 $\hat{N}$ 的本征值的降算符，

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle$$

我们看到：

$$\begin{aligned}
&(\hat{a})^2\,|n\rangle = \sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle, \quad (\hat{a})^3\,|n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)}\,|n-3\rangle \\
&(\hat{a})^4\,|n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}\,|n-4\rangle \\
&(\hat{a})^5\,|n\rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)(n-4)}\,|n-5\rangle \\
&\dots
\end{aligned}$$

由于 $\hat{N}$ 的本征值非负，上述通过降算符作用获取 $\hat{N}$ 属于较低本征值的本征态矢量的过程不可能无限制的持续下去. $\hat{N}$ 必定存在着最小的本征值 n_G，其对应的本征态 $|n_G\rangle$ 使得降算符的作用终止：[7]

$$\hat{a}\,|n_G\rangle = 0$$

比较本页两个红色方程，可知 $n_G = 0$.

[7] $|n_G\rangle$ 即为算符 $\hat{N}$ 的基态.

所以，厄米算符 $\hat{N} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ 的本征值只能取非负整数：

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad n = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

鉴于此，常称 $\hat{N}$ 为能级的占有数算符. 不难验证[8]：

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{\dagger})^{n}|0\rangle}$$

1. 一维量子力学简谐振子能量本征值问题的解为：

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad E_n = \left[n + \frac{1}{2}\right]\hbar\omega,$$

$$n = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

[8]请各位自行检验.

简谐振子的基态 $|0\rangle$:

简谐振子的基态 $|0\rangle$ 是占有数算符 $\hat{N}=\hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ 属于本征值 $n=0$ 的本征态，满足条件：

$$\hat{a}|0\rangle=0 \qquad \rightsquigarrow \quad \hat{H}|0\rangle=\frac{1}{2}\hbar\omega\,|0\rangle$$

下面我们在 $|0\rangle$ 态下检验海森堡不确定度关系是否成立. 因为,

$$\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}}-i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right], \qquad \hat{a}^{\dagger}=\frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}}+i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right]$$

我们看到：

$$\hat{x}=i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\hat{a}-\hat{a}^{\dagger}\right]$$

$$\hat{p}=\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left[\hat{a}+\hat{a}^{\dagger}\right]$$

位置坐标算符与动量算符在能量本征态 $|n\rangle$ 上的作用结果是:

$$\hat{x}|n\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}[\sqrt{n}\,|n-1\rangle - \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle]$$

$$\hat{p}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}[\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle]$$

进而,

$$\begin{aligned}\hat{x}^2|n\rangle &= -\frac{\hbar}{2m\omega}[\hat{a}-\hat{a}^\dagger][\sqrt{n}\,|n-1\rangle - \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle] \\ &= -\frac{\hbar}{2m\omega}\Big[\sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle - (2n+1)\,|n\rangle \\ &\qquad + \sqrt{(n+1)(n+2)}\,|n+2\rangle\Big]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{p}^2|n\rangle &= \frac{\hbar m\omega}{2}[\hat{a}+\hat{a}^\dagger][\sqrt{n}\,|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle] \\ &= \frac{\hbar m\omega}{2}\Big[\sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle + (2n+1)\,|n\rangle \\ &\qquad + \sqrt{(n+1)(n+2)}\,|n+2\rangle\Big]\end{aligned}$$

厄米算符属于不同本征值的本征矢量相互正交,

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

所以:

$$\langle n|\hat{x}|n\rangle = \langle n|\hat{p}|n\rangle = 0, \qquad \langle n|\hat{x}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(2n+1),$$
$$\langle n|\hat{p}^2|n\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}(2n+1).$$

特别地,对于简谐振子的基态 $|0\rangle$ 而言:

$$\langle 0|\hat{x}|0\rangle = \langle 0|\hat{p}|0\rangle = 0, \qquad \langle 0|\hat{x}^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}, \qquad \langle 0|\hat{p}^2|0\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}.$$

因此,$|0\rangle$ 态下谐振子位置坐标与动量的涨落分别为:

$$(\Delta x)_0 = \sqrt{\langle 0|\hat{x}^2|0\rangle - \langle 0|\hat{x}|0\rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

$$(\Delta p)_0 = \sqrt{\langle 0|\hat{p}^2|0\rangle - \langle 0|\hat{p}|0\rangle^2} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}$$

联立以上二式可知:

$$(\Delta x)_0\,(\Delta p)_0 = \frac{\hbar}{2}$$

提醒:

1. 把上式与任意态下位置坐标和动量涨落满足的不确定度关系做比较,

$$\Delta x\,\Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

可知简谐振子的基态是最小不确定量子态. 换言之, $|0\rangle$ 是最接近经典状态的量子态, 这类量子态统称为**相干态**.

位置表象中简谐振子的能量本征函数$\psi_n(x)$:

现在考虑计算位置表象中简谐振子的能量本征函数系.

- 首先计算基态波函数 $\psi_0(x) = \langle x|0\rangle$. 依前述,

$$\hat{a}\,|0\rangle = 0$$

所以,

$$\begin{aligned} 0 &= \langle x|\hat{a}|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\langle x|\left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} - i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right]|0\rangle \end{aligned}$$

借助于位置算符本征矢量系的完备性关系,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|x\rangle\langle x| = 1$$

可以把基态波函数满足的方程重新表达为：

$$
\begin{aligned}
0 &= \langle x|\left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} - i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right]|0\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dy \langle x|\left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} - i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right]|y\rangle\langle y|0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\int_{-\infty}^{+\infty} dy \langle x|\hat{p}|y\rangle \psi_0(y) - i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\int_{-\infty}^{+\infty} dy \langle x|\hat{x}|y\rangle \psi_0(y)
\end{aligned}
$$

因为，

$$
\langle x|\hat{p}|y\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-y), \qquad \langle x|\hat{x}|y\rangle = x\,\delta(x-y)
$$

上述方程最终化为如下一阶常微分方程：

$$
\psi_0'(x) + \alpha^2 x\,\psi_0(x) = 0, \qquad \left\{\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right\}
$$

$\psi_0(x)$ 满足的微分方程可以改写为：

$$\frac{d\psi_0(x)}{\psi_0(x)} = -\alpha^2\, x\, dx, \qquad \rightsquigarrow \quad d\big[\ln\psi_0(x)\big] = -\frac{\alpha^2}{2}dx^2$$

其解为：

$$\psi_0(x) = \mathcal{N} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

基态波函数的归一化条件

$$1 = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx \|\psi_0(x)\|^2 = \|\mathcal{N}\|^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\, e^{-\alpha^2 x^2} = \|\mathcal{N}\|^2 \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}$$

允许我们把归一化常数 $\mathcal{N}$ 选择为：

$$\mathcal{N} = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \qquad \rightsquigarrow \quad \psi_0(x) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2}$$

它正是我们期望的结论.

- 接着计算简谐振子任一能量本征态 $|n\rangle$ 在位置表象中的波函数:

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle$$

注意到:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$$

我们有,

$$\psi_n(x) = \langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, \langle x|(\hat{a}^\dagger)^n|y\rangle\, \psi_0(y)$$

根据

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} + i\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}\right]$$

以及

$$\langle x|\hat{p}|y\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\delta(x-y), \qquad \langle x|\hat{x}|y\rangle = x\,\delta(x-y)$$

推知:

$$\begin{aligned}\langle x|\hat{a}^\dagger|y\rangle &= -\frac{i}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{\partial}{\partial x}-\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right]\delta(x-y)\\ &= -\frac{i}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial x}-\alpha x\right]\delta(x-y)\end{aligned}$$

式中,

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

$$
\begin{aligned}
\langle x|(\hat{a}^\dagger)^2|y\rangle \quad &= \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dz \langle x|\hat{a}^\dagger|z\rangle \, \langle z|\hat{a}^\dagger|y\rangle \\
&= \left[-\frac{i}{\sqrt{2}}\right]^2 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dz \left[\frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial x} - \alpha x\right] \delta(x-z) \\
&\qquad\qquad \cdot \left[\frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial z} - \alpha z\right] \delta(z-y) \\
&= \left[\frac{1}{\sqrt{2}\, i}\right]^2 \left[\frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial x} - \alpha x\right] \\
&\qquad \cdot \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dz \, \delta(x-z) \, \left[\frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial z} - \alpha z\right] \delta(z-y) \\
&= \left[\frac{1}{\sqrt{2}\, i}\right]^2 \left[\frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial x} - \alpha x\right]^2 \delta(x-y)
\end{aligned}
$$

以此类推,有:

$$\langle x|(\hat{a}^\dagger)^n|y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}\ i^n}\left(\frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial x} - \alpha x\right)^n \delta(x-y), \qquad n = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

把此式代入到前面 $\psi_n(x)$ 的表达式中,即有:

$$\begin{aligned}
\psi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}\ i^n}\left(\frac{1}{\alpha}\frac{\partial}{\partial x} - \alpha x\right)^n \psi_0(x) \\
&= (-i)^n\sqrt{\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}}\left(\frac{\partial}{\partial \xi} - \xi\right)^n e^{-\xi^2/2} \\
&= i^n\ \mathcal{N}_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}
\end{aligned}$$

式中 $\xi = \alpha x,\quad n \in \mathbb{Z}^+$, 而

$$\mathcal{N}_n = \sqrt{\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}}$$

是 $\psi_n(x)$ 的归一化常数.

式中 $H_n(\xi)$ 是厄米多项式,

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2/2} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} - \xi \right)^n e^{-\xi^2/2}$$

容易验证, $\psi_n(x)$ 的上述表达式在波函数的概率诠释的意义下等价于前面通过求解常微分方程得到的结果.

1. 不难验证存在着如下数学恒等式 (Optional):

$$e^{-\xi^2/2} \left(\frac{\partial}{\partial \xi} - \xi \right)^n e^{-\xi^2/2} = \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2}$$

费米简谐振子

众所周知，自然界中的基本粒子划分为玻色子和费米子两种．简谐振子也可区分为玻色型谐振子与费米型谐振子．**玻色谐振子的哈密顿算符定义为：**

$$\boxed{\hat{H}_B = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\hat{a}_B^\dagger \hat{a}_B + \hat{a}_B \hat{a}_B^\dagger\right)}$$

$\hat{a}_B^\dagger$ 与 $\hat{a}_B$ 是占有数算符 $\hat{N}_B = \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_B$ 本征值的升降算符，满足对易关系：

$$\left[\hat{a}_B,\ \hat{a}_B^\dagger\right] = \hat{I}, \qquad [\hat{a}_B,\ \hat{a}_B] = \left[\hat{a}_B^\dagger,\ \hat{a}_B^\dagger\right] = 0.$$

- $\hat{H}_B$ 可通过 $\hat{N}_B$ 表达为：

$$\hat{H}_B = \hbar\omega\left(\hat{N}_B + \frac{1}{2}\right)$$

- $\hat{N}_B$ 的本征值方程及本征值谱为：

$$\hat{N}_B\left|n_B\right\rangle = n_B\left|n_B\right\rangle, \qquad n_B = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

- $\hat{N}_B$ 与升降算符的对易关系是:

$$[\hat{N}_B,\ \hat{a}_B] = -\hat{a}_B, \qquad \left[\hat{N}_B,\ \hat{a}_B^\dagger\right] = \hat{a}_B^\dagger$$

所以,

$$\hat{a}_B \left|n_B\right\rangle = \sqrt{n_B}\left|n_B - 1\right\rangle, \qquad \hat{a}_B^\dagger \left|n_B\right\rangle = \sqrt{n_B + 1}\left|n_B + 1\right\rangle$$

- $\hat{N}_B$ 的属于其最低本征值 $n_B = 0$ 的本征态 $\left|0\right\rangle$ 称为真空态:

$$\hat{a}_B \left|0\right\rangle = 0 \qquad \leadsto \hat{N}_B \left|0\right\rangle = 0, \qquad \hat{H}_B \left|0\right\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega \left|0\right\rangle$$

$\hat{N}_B$ 的其他本征态可通过真空态 $\left|0\right\rangle$ 表达为:

$$\boxed{\left|n_B\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{(n_B)!}}\left(\hat{a}_B^\dagger\right)^{n_B}\left|0\right\rangle, \qquad \forall n_B \in \mathbb{N}_+}$$

费米谐振子的哈密顿算符定义为：

$$\hat{H}_F = \frac{1}{2}\hbar\omega\left(\hat{a}_F^\dagger \hat{a}_F - \hat{a}_F \hat{a}_F^\dagger\right)$$

$\hat{a}_F^\dagger$ 与 $\hat{a}_F$ 是占有数算符 $\hat{N}_F = \hat{a}_F^\dagger \hat{a}_F$ 本征值的升降算符，满足反对易关系[9]：

$$\left\{\hat{a}_F,\ \hat{a}_F^\dagger\right\} = \hat{I}, \qquad \{\hat{a}_F,\ \hat{a}_F\} = \left\{\hat{a}_F^\dagger,\ \hat{a}_F^\dagger\right\} = 0.$$

- 费米占有数升降算符具有性质：

$$(\hat{a}_F)^2 = \left(\hat{a}_F^\dagger\right)^2 = 0$$

- $\hat{H}_F$ 可通过 $\hat{N}_F$ 表达为：

$$\hat{H}_F = \hbar\omega\left(\hat{N}_F - \frac{1}{2}\right)$$

---

[9] 反对易关系定义为：

$$\left\{\hat{a},\ \hat{b}\right\} \equiv \hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a}$$

- 设 $\hat{N}_F$ 的本征值方程为:

$$\hat{N}_F |n_F\rangle = n_F |n_F\rangle$$

我们有:

$$\begin{aligned}(n_F)^2 |n_F\rangle &= n_F \left[\hat{N}_F |n_F\rangle\right] = \hat{N}_F [n_F |n_F\rangle] = \hat{N}_F \hat{N}_F |n_F\rangle \\ &= \hat{a}_F^\dagger \hat{a}_F \hat{a}_F^\dagger \hat{a}_F |n_F\rangle = \hat{a}_F^\dagger \left(\hat{I} - \hat{a}_F^\dagger \hat{a}_F\right) \hat{a}_F |n_F\rangle \\ &= \hat{a}_F^\dagger \hat{a}_F |n_F\rangle = \hat{N}_F |n_F\rangle = n_F |n_F\rangle\end{aligned}$$

亦即,

$$\left[(n_F)^2 - n_F\right] |n_F\rangle = 0, \quad \rightsquigarrow \quad (n_F)^2 - n_F = 0, \quad \rightsquigarrow \quad n_F = 0,\ 1$$

费米占有数算符的本征态空间是一个二维的 Hilbert 空间, 其基矢为 $|0\rangle$ 与 $|1\rangle$. 这里 $|0\rangle$ 是真空态:

$$\hat{a}_F |0\rangle = 0 \qquad \rightsquigarrow \hat{H}_F |0\rangle = -\frac{1}{2}\hbar\omega |0\rangle$$

- $n_F = 0,\ 1$ 暗合了近代物理学历史上著名的**泡利不相容原理**.
- 借助数学恒等式

$$\left[\hat{a}\hat{b},\ \hat{c}\right] = \hat{a}\hat{b}\hat{c} - \hat{c}\hat{a}\hat{b} = \hat{a}\hat{b}\hat{c} + \hat{a}\hat{c}\hat{b} - \hat{a}\hat{c}\hat{b} - \hat{c}\hat{a}\hat{b}$$
$$= \hat{a}\left(\hat{b}\hat{c} + \hat{c}\hat{b}\right) - (\hat{a}\hat{c} + \hat{c}\hat{a})\,\hat{b} = \hat{a}\left\{\hat{b},\ \hat{c}\right\} - \{\hat{a},\ \hat{c}\}\hat{b}$$

不难证明:

$$[\hat{N}_F,\ \hat{a}_F] = -\hat{a}_F, \qquad \left[\hat{N}_F,\ \hat{a}_F^\dagger\right] = \hat{a}_F^\dagger$$

进而:

$$\hat{a}_F^\dagger|0\rangle = |1\rangle,$$
$$\hat{a}_F^\dagger|1\rangle = \left(\hat{a}_F^\dagger\right)^2|0\rangle = 0.$$

这些关系保持了归一化条件 $\langle 0|0\rangle = \langle 1|1\rangle = 1$.

费米谐振子的泡利表象

在所谓泡利表象中，费米占有数升降算符可通过如下非厄米矩阵实现：

$$a_F^\dagger = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad a_F = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

因此，费米占有数算符在泡利表象中表现为如下厄米矩阵：

$$N_F = a_F^\dagger a_F = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

1. 量子力学中常引入泡利矩阵：

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

三个泡利矩阵均为厄米矩阵 ($\sigma_i^\dagger = \sigma_i$)且服从代数关系：

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} I_2 + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$$

不难看出：

$$\boxed{a_F = \frac{1}{2}(\sigma_1 - i\sigma_2), \qquad a_F^\dagger = \frac{1}{2}(\sigma_1 + i\sigma_2)}$$

检验如下：

$$a_F a_F^\dagger = \frac{1}{4}(\sigma_1 - i\sigma_2)(\sigma_1 + i\sigma_2) = \frac{1}{2}(I_2 - \sigma_3) = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$a_F^\dagger a_F = \frac{1}{2}(I_2 + \sigma_3) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = N_F$$

$$\left\{a_F,\ a_F^\dagger\right\} = a_F a_F^\dagger + a_F^\dagger a_F = I_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

费米谐振子的哈密顿算符在泡利表象中的矩阵实现 H_F 和真空态归一化波函数 ψ_0 分别为：

$$H_F = \hbar\omega\left(N_F - \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_3 = \frac{1}{2}\hbar\omega\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\psi_0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad \rightsquigarrow \quad a_F\,\psi_0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = 0$$

相干态:

相干态并不是唯一的. 玻色型降算符 $\hat{a}$ 的任一本征态 $|\alpha\rangle$ 均是相干态:

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle, \qquad \alpha \in \mathbb{C}$$

1. 相干态 $|\alpha\rangle$ 是最小不确定量子态:

$$(\Delta x)_\alpha\,(\Delta p)_\alpha = \frac{\hbar}{2}$$

2. 归一化的相干态 $|\alpha\rangle$ 可以表达为玻色型简谐振子能量本征矢量的如下线性叠加:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle$$

3. 玻色型简谐振子的基态是 $\alpha = 0$ 的特殊相干态:

$$|0\rangle = |\alpha\rangle\Big|_{\alpha=0}$$

下面逐一证明以上结论.

首先检验 $|\alpha\rangle$ 的确是最小不确定度量子态. 注意到 $|\alpha\rangle$ 与 $\langle\alpha|$ 互为厄米共轭, 我们有:

$$
\begin{aligned}
&\langle\alpha|\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha, \qquad \langle\alpha|\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{a}|\alpha\rangle^\dagger = \alpha^*,\\
&\langle\alpha|\hat{a}^2|\alpha\rangle = \alpha^2,\\
&\langle\alpha|(\hat{a}^\dagger)^2|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hat{a}^2|\alpha\rangle^\dagger = (\alpha^*)^2,\\
&\langle\alpha|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha\langle\alpha|\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \alpha\alpha^*,\\
&\langle\alpha|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \langle\alpha|(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1)|\alpha\rangle = \alpha^*\alpha + 1.
\end{aligned}
$$

借助于这些公式, 我们现在求相干态 $|\alpha\rangle$ 下谐振子的位置坐标、动量及其平方等物理量的平均值:

$$
\begin{aligned}
\langle x\rangle_\alpha &= \langle\alpha|\hat{x}|\alpha\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle\alpha|\left[\hat{a}-\hat{a}^\dagger\right]|\alpha\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\alpha-\alpha^*)\\
&= -\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,\mathrm{Im}(\alpha)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle p \rangle_\alpha &= \langle \alpha | \hat{p} | \alpha \rangle \\
&= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle \alpha | \left[\hat{a} + \hat{a}^\dagger \right] | \alpha \rangle \\
&= \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\alpha + \alpha^*) \\
&= \sqrt{2m\hbar\omega}\ \mathrm{Re}(\alpha)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left\langle x^2 \right\rangle_\alpha &= \langle \alpha | \hat{x}^2 | \alpha \rangle \\
&= -\frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | \left[\hat{a} - \hat{a}^\dagger \right]^2 | \alpha \rangle \\
&= -\frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | \left[\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 - \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} \right] | \alpha \rangle \\
&= -\frac{\hbar}{2m\omega} \left[\alpha^2 + (\alpha^*)^2 - 2\alpha\alpha^* - 1 \right] \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega} \left\{ 1 + 4\left[\mathrm{Im}(\alpha) \right]^2 \right\}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle p^2 \rangle_\alpha &= \langle \alpha | \hat{p}^2 | \alpha \rangle = \frac{m\hbar\omega}{2} \langle \alpha | \left[\hat{a} + \hat{a}^\dagger \right]^2 | \alpha \rangle \\
&= \frac{m\hbar\omega}{2} \langle \alpha | \left[\hat{a}^2 + (\hat{a}^\dagger)^2 + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} \right] | \alpha \rangle \\
&= \frac{m\hbar\omega}{2} \left[\alpha^2 + (\alpha^*)^2 + 2\alpha\alpha^* + 1 \right] = \frac{m\hbar\omega}{2} \left\{ 1 + 4\left[\mathrm{Re}(\alpha) \right]^2 \right\}
\end{aligned}
$$

因此，相干态 $|\alpha\rangle$ 下谐振子位置坐标与动量的涨落分别为：

$$
(\Delta x)_\alpha = \sqrt{\langle x^2 \rangle_\alpha - (\langle x \rangle_\alpha)^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}
$$

$$
(\Delta p)_\alpha = \sqrt{\langle p^2 \rangle_\alpha - (\langle p \rangle_\alpha)^2} = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}
$$

二者的乘积是：

$$
(\Delta x)_\alpha (\Delta p)_\alpha = \frac{\hbar}{2}
$$

这正是海森堡不确定度关系所允许的最小值. $|\alpha\rangle$ 的确是具有最小不确定度的量子态.

接下来检验第二个命题. 占有数算符 $\hat{N}$ 是厄米算符, 其本征矢量的完备集合形成了 Hilbert 空间的一组基. 所以,

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n(\alpha)\,|n\rangle$$

现设法确定叠加系数. 因为 $|\alpha\rangle$ 是降算符的本征态, 我们有:

$$\begin{aligned}
\alpha \sum_{n=0}^{+\infty} c_n(\alpha)\,|n\rangle &= \alpha\,|\alpha\rangle = \hat{a}\,|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} c_n(\alpha)\,\hat{a}\,|n\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{+\infty} c_n(\alpha)\sqrt{n}\,|n-1\rangle = \sum_{n=0}^{+\infty} c_{n+1}(\alpha)\sqrt{n+1}\,|n\rangle
\end{aligned}$$

从而,

$$\begin{aligned}
c_{n+1}(\alpha) &= \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} c_n = \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} \cdot \frac{\alpha}{\sqrt{n}} c_{n-1} \\
&= \frac{\alpha}{\sqrt{n+1}} \cdot \frac{\alpha}{\sqrt{n}} \cdot \frac{\alpha}{\sqrt{n-1}} c_{n-2} = \cdots, \quad \rightsquigarrow c_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0(\alpha)
\end{aligned}$$

上式表明：

$$|\alpha\rangle = c_0(\alpha)\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

可以把 $c_0(\alpha)$ 视为 $|\alpha\rangle$ 的归一化常数. 按照归一化条件：

$$\begin{aligned}
1 &= \langle\alpha|\alpha\rangle = \|c_0(\alpha)\|^2\sum_{m,n=0}^{+\infty}\frac{(\alpha^*)^m\alpha^n}{\sqrt{m!n!}}\langle m|n\rangle \\
&= \|c_0(\alpha)\|^2\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\|\alpha\|^{2n}}{n!} \\
&= \|c_0(\alpha)\|^2 e^{\|\alpha\|^2} \quad \rightsquigarrow \quad c_0(\alpha) = \exp\left[-\frac{1}{2}\|\alpha\|^2\right]
\end{aligned}$$

所以，

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}\|\alpha\|^2}\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

此式即为第二命题的结论.

上式的一个简单推论是:

$$\left.|\alpha\rangle\right|_{\alpha=0}=e^{-\frac{1}{2}\|\alpha\|^2}\sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\left.|n\rangle\right|_{\alpha=0}=|0\rangle$$

即简谐振子的最低能量本征态 (基态) 是一个相干态. 这就是第三命题的内容.

超对称简谐振子

一维定态薛定谔方程束缚态问题精确解的解法中, 80 年代发展起来的超对称量子力学方法值得了解和学习. **超对称**是理论物理学家臆测的存在于体系玻色自由度与费米自由度之间的一种对称性[10].

为了让各位对超对称性有一个比较明确的了解, 我们考虑一个由具有相同频率 ω 的玻色谐振子和费米谐振子构成的体系:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_B + \hat{H}_F \\ &= \hbar\omega\left(\hat{a}_B^\dagger \hat{a}_B + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\left(\hat{a}_F^\dagger \hat{a}_F - \frac{1}{2}\right) \\ &= \hbar\omega\left(\hat{a}_B^\dagger \hat{a}_B + \hat{a}_F^\dagger \hat{a}_F\right) \\ &= \hbar\omega\left(\hat{N}_B + \hat{N}_F\right)\end{aligned}$$

以下称由此哈密顿算符描写的量子力学体系为超对称简谐振子.

[10]尴尬的事情是: 迄今为止的物理实验尚未证实超对称的真实存在.

- 很明显，超对称简谐振子的能量本征态 $|n_B,\ n_F\rangle$

$$\hat{H}|n_B,\ n_F\rangle = E_{n_B,n_F}|n_B,\ n_F\rangle$$

是玻色谐振子能量本征态 $|n_B\rangle$ 与费米谐振子能量本征态 $|n_F\rangle$ 的直积[11]：

$$|n_B,\ n_F\rangle = |n_B\rangle \otimes |n_F\rangle$$

- 注意到 $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N}_B + \hat{N}_F)$，且

$$\hat{N}_B|n_B\rangle = n_B|n_B\rangle; \quad n_B = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$
$$\hat{N}_F|n_F\rangle = n_F|n_F\rangle; \quad n_F = 0,\ 1.$$

我们看到超对称简谐振子的能量本征值谱是：

$$E_{n_B,n_F} = (n_B + n_F)\hbar\omega\ ; \qquad n_B = 0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots;\quad n_F = 0,\ 1.$$

显然，$E_{n_B,n_F} \geqslant 0$.

[11]所以，超对称简谐振子的哈密顿算符 $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N}_B + \hat{N}_F)$ 应准确地表达为：

$$\hat{H} = \hbar\omega\left[\hat{N}_B \otimes \hat{I}_F + \hat{I}_B \otimes \hat{N}_F\right]$$

- 超对称简谐振子的基态 (真空态) 是 $|0,\ 0\rangle$, 具有性质:

$$\hat{a}_B|0,\ 0\rangle = \hat{a}_F|0,\ 0\rangle = 0$$

  且 $E_{0,0} = 0$.
- 异于玻色谐振子或者费米谐振子, 超对称简谐振子的激发态能级都是二重简并的. 属于能量本征值 $(n_B+1)\hbar\omega$ 的能量本征态有两个:

$$|n_B,\ 1\rangle, \qquad |n_B+1,\ 0\rangle$$

  体系能级的这个简并恰好反映了 $n_F = 0$ 的玻色型本征态 $|n_B+1,\ 0\rangle$ 与 $n_F = 1$ 的费米型本征态 $|n_B,\ 1\rangle$ 之间的某种对称性. 这正是所谓的超对称.
- 很明显,

$$\hat{a}_B\hat{a}_F^\dagger|n_B+1,\ 0\rangle = \sqrt{n_B+1}\ |n_B,\ 1\rangle,$$
$$\hat{a}_B^\dagger\hat{a}_F|n_B,\ 1\rangle = \sqrt{n_B+1}\ |n_B+1,\ 0\rangle$$

  即通过非厄米算符 $\hat{a}_B\hat{a}_F^\dagger$ 和 $\hat{a}_B^\dagger\hat{a}_F$ 可以实现超对称简谐振子玻色型能量本征态与费米型能量本征态之间的转换.

- 这两个非厄米算符形成了超对称变换的生成元[12]：

$$\hat{Q} = \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_F, \quad \hat{Q}^\dagger = \hat{a}_B \hat{a}_F^\dagger$$

$\hat{Q}$ 与 $\hat{Q}^\dagger$ 是费米型的算符. 不难看出：

$$\hat{Q}^2 = \left(\hat{Q}^\dagger\right)^2 = 0$$

且

$$\begin{aligned}\left\{\hat{Q},\ \hat{Q}^\dagger\right\} &= \left\{\hat{a}_B^\dagger \hat{a}_F,\ \hat{a}_B \hat{a}_F^\dagger\right\} = \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_F \hat{a}_B \hat{a}_F^\dagger + \hat{a}_B \hat{a}_F^\dagger \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_F \\ &= \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_B \hat{a}_F \hat{a}_F^\dagger + \hat{a}_B \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_F^\dagger \hat{a}_F \\ &= \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_B \left(\hat{I} - \hat{a}_F^\dagger \hat{a}_F\right) + \left(\hat{I} + \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_B\right) \hat{a}_F^\dagger \hat{a}_F \\ &= \hat{a}_B^\dagger \hat{a}_B + \hat{a}_F^\dagger \hat{a}_F = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega}\end{aligned}$$

---

[12]通常约定：

$$[a_B,\ a_F] = \left[a_B,\ a_F^\dagger\right] = \left[a_B^\dagger,\ a_F\right] = \left[a_B^\dagger,\ a_F^\dagger\right] = 0$$

这是因为 $a_B, a_B^\dagger$ 与 $a_F, a_F^\dagger$ 分属体系不同的自由度.

- 不难看出：

$$
\begin{aligned}
\left[\hat{H},\ \hat{Q}\right] &= \hbar\omega\left[\hat{a}_B^\dagger\hat{a}_B + \hat{a}_F^\dagger\hat{a}_F,\ \hat{a}_B^\dagger\hat{a}_F\right] \\
&= \hbar\omega\left[\hat{a}_B^\dagger\hat{a}_B,\ \hat{a}_B^\dagger\right]\hat{a}_F + \hbar\omega\hat{a}_B^\dagger\left[\hat{a}_F^\dagger\hat{a}_F,\ \hat{a}_F\right] \\
&= \hbar\omega\hat{a}_B^\dagger\left[\hat{a}_B,\ \hat{a}_B^\dagger\right]\hat{a}_F - \hbar\omega\hat{a}_B^\dagger\left\{\hat{a}_F^\dagger,\ \hat{a}_F\right\}\hat{a}_F \\
&= \hbar\omega\left(\hat{a}_B^\dagger\,\hat{a}_F - \hat{a}_B^\dagger\,\hat{a}_F\right) \\
&= 0, \\
\left[\hat{H},\ \hat{Q}^\dagger\right] &= 0.
\end{aligned}
$$

所以，$\hat{Q}$, $\hat{Q}^\dagger$ 与 $\hat{H}$ 形成了一个阶化 (Graded) 李代数：

$$
\boxed{\hat{Q}^2 = \left(\hat{Q}^\dagger\right)^2 = 0, \quad \left\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\right\} \sim \hat{H}, \quad \left[\hat{H}, \hat{Q}\right] = \left[\hat{H}, \hat{Q}^\dagger\right] = 0}
$$

通常称之为 $N = 1$ 超对称代数.

超对称量子力学

在位置表象中，超对称量子力学体系由如下超对称变换的生成元定义：

$$\boxed{\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2\mu}}\left[\hat{P} + iW(x)\right]\sigma_+, \qquad \hat{Q}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\mu}}\left[\hat{P} - iW(x)\right]\sigma_-}$$

式中，

$$\hat{P} = -i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \quad \sigma_\pm = \frac{1}{2}\left(\sigma_1 \pm i\sigma_2\right), \quad \sigma_- = (\sigma_+)^\dagger .$$

$W(x)$ 称为**超势** (Superpotential)，要求其为位置坐标 x 的实函数. 体系的哈密顿算符由超对称代数确定. 倘若设：

$$\hat{A}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2\mu}}\left[\hat{P} \mp iW(x)\right] = -i\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \pm \frac{1}{\hbar}W(x)\right] \quad \rightsquigarrow \quad \hat{A}_- = \left(\hat{A}_+\right)^\dagger$$

我们有：

$$\hat{H} = \left\{\hat{Q},\ \hat{Q}^\dagger\right\} = \left\{\hat{A}_-\sigma_+,\ \hat{A}_+\sigma_-\right\} = \hat{A}_-\hat{A}_+\sigma_+\sigma_- + \hat{A}_+\hat{A}_-\sigma_-\sigma_+$$

亦即：

$$\hat{H}=\begin{bmatrix}\hat{A}_-\hat{A}_+ & 0\\ 0 & \hat{A}_+\hat{A}_-\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\hat{H}_- & 0\\ 0 & \hat{H}_+\end{bmatrix}$$

式中，

$$\begin{aligned}\hat{H}_- \quad &:= \hat{A}_-\hat{A}_+ = \frac{1}{2\mu}\left[\hat{P}+iW(x)\right]\left[\hat{P}-iW(x)\right]\\ &= \frac{1}{2\mu}\left[\hat{P}^2+W(x)^2-\hbar\frac{\mathrm{d}W(x)}{\mathrm{d}x}\right],\\ \hat{H}_+ \quad &:= \hat{A}_+\hat{A}_- = \frac{1}{2\mu}\left[\hat{P}^2+W(x)^2+\hbar\frac{\mathrm{d}W(x)}{\mathrm{d}x}\right]\end{aligned}$$

这里使用了对易关系

$$\left[\hat{P},W(x)\right]=-i\hbar\frac{\mathrm{d}W(x)}{\mathrm{d}x}$$

显然，$\left(\hat{H}_\pm\right)^\dagger=\hat{H}_\pm$. **超对称量子力学把由哈密顿算符 $\hat{H}_\pm$ 定义的两个普通量子力学体系联系起来了：**

$$\hat{H}_\pm=\frac{\hat{P}^2}{2\mu}+V_\pm(x),\qquad V_\pm(x):=\frac{1}{2\mu}\left[W(x)^2\pm\hbar\frac{\mathrm{d}W(x)}{\mathrm{d}x}\right]$$

超对称量子力学体系的哈密顿算符 $\hat{H}$ 具有半正定的本征值谱. 这是因为 $\hat{H}$ 在任意量子态下的系综平均值满足不等式:

$$\langle E\rangle_\Psi = \langle\Psi|\hat{H}|\Psi\rangle = \langle\Psi|\left\{\hat{Q},\hat{Q}^\dagger\right\}|\Psi\rangle = \left\|\hat{Q}|\Psi\rangle\right\|^2 + \left\|\hat{Q}^\dagger|\Psi\rangle\right\|^2 \geqslant 0$$

同理, $\hat{H}_\pm$ 也具有半正定的本征值谱.

- 以 $|0\rangle$ 表示 $\hat{H}$ 的基态. **倘若**

  $$\hat{Q}|0\rangle = \hat{Q}^\dagger|0\rangle = 0$$

  则称体系具有超对称性. 此情形下超对称量子力学体系的基态能量本征值为零:

  $$\hat{H}|0\rangle = 0$$

  倘若

  $$\hat{Q}|0\rangle \neq 0$$

  则称体系的超对称性发生了自发破缺.

- $\hat{H}$ 的超对称基态 $|0\rangle$ 在位置-泡利表象中的波函数可取为:

$$|0\rangle \sim \begin{bmatrix} \psi_0(x) \\ 0 \end{bmatrix} = \psi_0(x) \otimes \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

如此选择确保了超对称条件 $Q^\dagger|0\rangle = 0$ 的自动满足. 为保证另一超对称条件 $Q|0\rangle = 0$, 式中 $\psi_0(x)$ 须满足约束方程:

$$0 = \hat{A}_+\psi_0(x) = -i\frac{\hbar}{\sqrt{2\mu}}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{W(x)}{\hbar}\right]\psi_0(x)$$

显然, 超势 $W(x)$ 与 $\psi_0(x)$ 存在如下联系:

$$\boxed{W(x) = -\hbar\frac{\mathrm{d}\left[\ln\psi_0(x)\right]}{\mathrm{d}x}}$$

- 也可以把 $\psi_0(x)$ 诠释为哈密顿算符 $\hat{H}_- = \hat{A}_-\hat{A}_+$ 属于最小本征值 (零) 的基态波函数:

$$\hat{H}_-\psi_0(x) = 0$$

- 不计 $\hat{H}_-$ 的零本征值 (基态能量), $\hat{H}_\pm$ 具有完全相同的本征值谱. 证明如下. 设 $\psi(x)$ 是 $\hat{H}_- = \hat{A}_-\hat{A}_+$ 属于非零本征值 λ 的本征函数:

$$\hat{H}_-\psi(x) = \lambda\psi(x) \qquad \rightsquigarrow \hat{A}_-\hat{A}_+\psi(x) = \lambda\psi(x)$$

由此知[13]:

$$\lambda\Big[\hat{A}_+\psi(x)\Big] = \hat{A}_+\Big[\lambda\psi(x)\Big] = \hat{A}_+\Big[\hat{A}_-\hat{A}_+\psi(x)\Big] = \hat{A}_+\hat{A}_-\Big[\hat{A}_+\psi(x)\Big]$$

换言之, $\hat{A}_+\psi(x)$ 是伴侣哈密顿算符 $\hat{H}_+ = \hat{A}_+\hat{A}_-$ 属于同一本征值 λ 的本征函数:

$$\hat{H}_+\Big[\hat{A}_+\psi(x)\Big] = \lambda\Big[\hat{A}_+\psi(x)\Big]$$

所以, 求解了 $\hat{H}_-$ 的本征值问题后, 其超对称伴侣 $\hat{H}_+$ 的本征值问题也就随之一并解决了.

---

[13]之所以要排除 $\lambda = 0$, 是因为 $\hat{A}_+\psi(x) \neq 0$.

例:

考虑宽度为 a 的一维无限深方势阱,

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leqslant x \leqslant a \\ \infty, & \text{either } x < 0 \text{ or } x > a \end{cases}$$

质量为 μ 的量子力学粒子在此势阱中运动时处于束缚态,其能量本征值谱为:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}; \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

相应的归一化能量本征函数系为:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(n\pi x/a\right)\theta(x)\theta(a-x)$$

- 受上述无限深方势阱问题的启发,假设存在一个被限制在有限区间 $0 \leqslant x \leqslant a$ 的一维量子力学体系,其基态波函数为:

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\pi x/a\right), \qquad 0 \leqslant x \leqslant a$$

- 使用 $\psi_1(x)$ 构造超势：

$$W(x) := -\hbar \frac{\mathrm{d} \ln \left[\psi_1(x)\right]}{\mathrm{d}x} = -\frac{\pi\hbar}{a} \cot\left(\pi x/a\right)$$

据此我们可以构造出由超对称性相联系的一对哈密顿算符 $\hat{H}_\pm$：

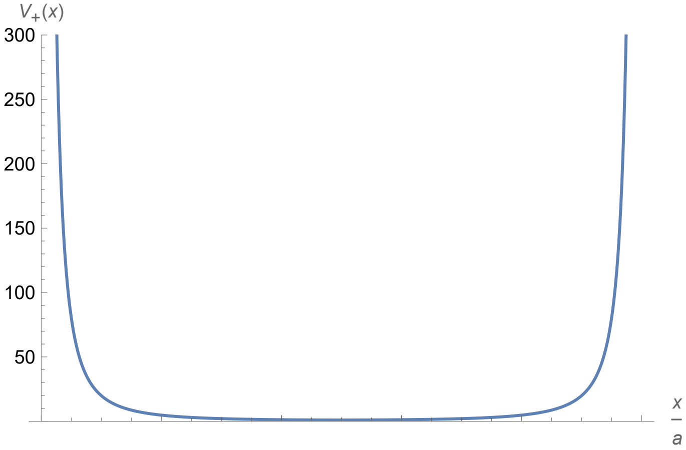
$$\hat{H}_\pm := -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2\mu}\left[W(x)^2 \pm \hbar \frac{\mathrm{d}W(x)}{\mathrm{d}x}\right]$$

- 不难求得：

$$\hat{H}_+ = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\left\{\frac{1+\cos^2\left(\pi x/a\right)}{1-\cos^2\left(\pi x/a\right)}\right\}$$

而，

$$\hat{H}_- = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$$



$$V_+(x) = \frac{\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}\left\{\frac{1+\cos^2(\pi x/a)}{1-\cos^2(\pi x/a)}\right\}, \qquad 0 \leqslant x \leqslant a$$

$V_+(x)$ 是一个无限深势阱，但直接求解 $\hat{H}_+$ 的本征值问题明显是有难度的（参见朗道的量子力学著作）.

- 幸运的是, $\hat{H}_-$ 的本征值问题很容易求解. 其结果几乎完全等同于一维无限深方势阱情形下哈密顿算符本征值问题的束缚态解:

$$E_n^{(-)}=\frac{(n^2-1)\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2},\quad \psi_n^{(-)}(x)=\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(n\pi x/a),\qquad 0\leqslant x\leqslant a$$

式中量子数 n 的可能取值为 $n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots$.

- 于是依据超对称量子力学方法, $\hat{H}_+$ 的束缚态本征值谱是:

$$E_n^{(+)}=\frac{n(n+2)\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2},\quad n=1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

$\hat{H}_+$ 属于本征值 $E_n^{(+)}$ 的本征函数为:

$$\psi_n^{(+)}(x)=\hat{A}_+\psi_{n+1}^{(-)}(x)$$

式中

$$\hat{A}_+=\frac{1}{\sqrt{2\mu}}\left[-i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-iW(x)\right]=-\frac{i\hbar}{\sqrt{2\mu}}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-\frac{\pi}{a}\cot(\pi x/a)\right]$$

通过简单的计算不难看出[14]：

$$\psi_n^{(+)}(x) = -\frac{i\hbar}{\sqrt{\mu a}}\frac{\pi}{a}\Big\{(n+1)\cos\left[(n+1)\pi x/a\right] - \cot(\pi x/a)\sin\left[(n+1)\pi x/a\right]\Big\}$$

$$= -\frac{i\hbar}{\sqrt{\mu a}}\frac{\pi}{2a}\left\{\frac{n\sin\left[(n+2)\pi x/a\right] - (n+2)\sin(n\pi x/a)}{\sin(\pi x/a)}\right\}$$

点评：

- 注意到数学恒等式

$$\lim_{x\to 0}\frac{\sin(n\pi x/a)}{\sin(\pi x/a)} = n, \qquad \lim_{x\to a}\frac{\sin(n\pi x/a)}{\sin(\pi x/a)} = (-1)^{n+1}n$$

上述波函数 $\psi_n^{(+)}(x)$ 的确满足束缚态条件：

$$\psi_n^{(+)}(0) = \psi_n^{(+)}(a) = 0$$

[14]值得注意的是，波函数 $\psi_n^{(+)}(x)$ 的如此表达式尚未归一化.

形状不变的势能:

一般情形下, 超对称量子力学方法只能把表观上相差甚远的两个量子力学体系 $\hat{H}_+$ 和 $\hat{H}_-$ 联系起来. 进一步地, **倘若 $\hat{H}_\pm$ 的势能项 $V_\pm(x)$ 具有"形状不变性", 则 $\hat{H}_\pm$ 的本征值问题可以通过超对称量子力学方法精确求解.**

所谓形状不变性, 指的是超对称伴侣 $\hat{H}_\pm$ 的势能项存在如下关系:

$$V_+(x, a_i) = V_-(x, a_{i+1}) + R(a_{i+1})$$

式中 a_i 和 a_{i+1} 是某些常参数 $(i = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots)$, $R(a_{i+1})$ 是 a_{i+1} 的已知函数. 在此情形下,

$$\hat{H}_-(a_i) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_-(x, a_i)$$

而其超对称伴侣表达为:

$$\begin{aligned}\hat{H}_+(a_i) &= -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_+(x, a_i) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_-(x, a_{i+1}) + R(a_{i+1})\\ &= \hat{H}_-(a_{i+1}) + R(a_{i+1})\end{aligned}$$

- 约定 $\hat{H}_-(a_i)$ 的基态能量为零：

$$E_0^{(-)}(a_i) = 0 \qquad \rightsquigarrow \quad \hat{H}_-(a_i)\psi_0^{(-)}(x, a_i) = 0, \quad i = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots$$

  我们看到：

$$\hat{H}_+(a_i)\psi_0^{(-)}(x, a_{i+1}) = R(a_{i+1})\psi_0^{(-)}(x, a_{i+1})$$

  所以 $\hat{H}_+(a_i)$ 的基态波函数为 $\psi_0^{(-)}(x, a_{i+1})$，基态能量为 $R(a_{i+1})$：

$$\psi_0^{(+)}(x, a_i) = \psi_0^{(-)}(x, a_{i+1}), \qquad E_0^{(+)}(a_i) = R(a_{i+1})$$

- 根据超对称伴侣哈密顿算符 $\hat{H}_\pm(a_i)$ 本征值谱的关系，我们推论出 $R(a_{i+1})$ 既是 $\hat{H}_+(a_i)$ 的基态能量， 也是 $\hat{H}_-(a_i)$ 第一激发态能量：

$$E_1^{(-)}(a_i) = R(a_{i+1})$$

  物理逻辑的自洽性要求 $R(a_{i+1}) > 0$.

- 在形状不变势情形下，通过调整势能项中的常参数，我们可以基于超对称伴侣哈密顿算符 $\hat{H}_{\pm}$ 构造出一个哈密顿算符序列：

$$
\begin{aligned}
\hat{H}^{(0)} &= \hat{H}_{-}(a_0) \\
\hat{H}^{(1)} &= \hat{H}_{+}(a_0) = \hat{H}_{-}(a_1) + R(a_1) \\
\hat{H}^{(2)} &= \hat{H}_{+}(a_1) + R(a_1) = \hat{H}_{-}(a_2) + R(a_2) + R(a_1) \\
\hat{H}^{(3)} &= \hat{H}_{+}(a_2) + R(a_2) + R(a_1) \\
&= \hat{H}_{-}(a_3) + R(a_3) + R(a_2) + R(a_1) \\
&\cdots\cdots
\end{aligned}
$$

其通式表达为：

$$
\boxed{\hat{H}^{(0)} = \hat{H}_{-}(a_0), \quad \hat{H}^{(n)} = \hat{H}_{-}(a_n) + \sum_{i=1}^{n} R(a_i) \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ \cdots}
$$

以 $\hat{H}^{(0)}$ 定义的体系作为研究对象，我们看到其基态能量本征值为零 $(E_0 = 0)$，第 n 个激发态的能量本征值为：

$$
E_n = \sum_{i=1}^{n} R(a_i) \quad n = 1,\ 2,\ 3,\ \cdots
$$

例：

考虑如下一维有限深势阱[15]：

$$V(x) = -U_0 \,\mathrm{sech}^2(\alpha x), \qquad U_0 > 0,\ \alpha > 0, \quad -\infty < x < \infty$$

质量为 μ 的量子力学粒子在此势阱中运动时处于束缚态. 现使用超对称量子力学方法求其能量本征值谱. 体系的哈密顿算符为：

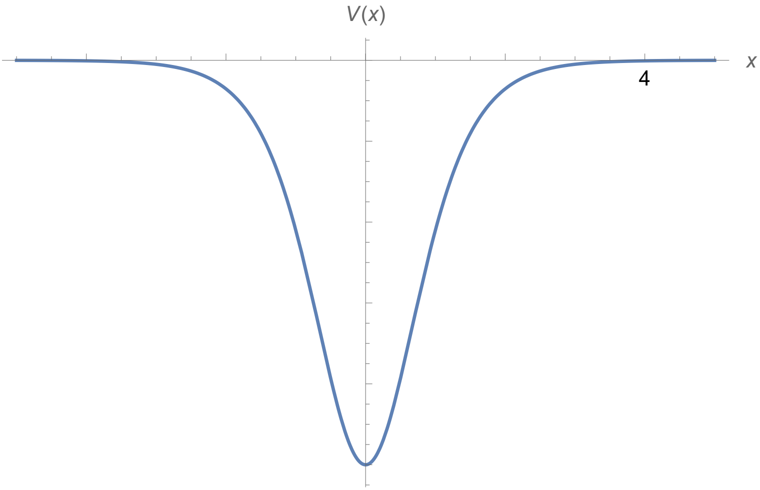
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - U_0 \,\mathrm{sech}^2(\alpha x)$$

我们潜意识中暂时把此 $\hat{H}$ 认同为 $\hat{H}_-$，因此须按下式确定超势 $W(x)$：

$$\left[W(x)\right]^2 - \hbar\frac{\mathrm{d}W(x)}{\mathrm{d}x} = -2\mu U_0 \,\mathrm{sech}^2(\alpha x)$$

受数学恒等式 $\mathrm{sech}^2\beta = 1 - \tanh^2\beta$ 的启发，试取 $W(x) = A\hbar \tanh(\alpha x)$.

[15] 朗道等著，量子力学（中译本），Page 67.



$$V(x) = -U_0 \,\mathrm{sech}^2(\alpha x)$$

然而上述超势方程无解，除非我们重新定义势能项使之变为：

$$V_-(x) = \frac{\hbar^2 A^2}{2\mu} - U_0\,\mathrm{sech}^2(\alpha x) \qquad \rightsquigarrow \quad \hat{H}_- = \hat{H} + \frac{\hbar^2 A^2}{2\mu}$$

超势 $W(x)$ 中的常参数 A 决定于如下代数方程

$$A^2 + \alpha A = \frac{2\mu}{\hbar^2} U_0$$

其通解为：

$$A^{(\pm)} = -\frac{\alpha}{2}\left[1 \pm \sqrt{1 + \frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}\,\right]$$

- 经尝试我们发现 $A^{(+)}$ 给不出物理上合理的形状不变势，故以下我们按 $A^{(-)}$ 规定常参数 A 的取值：

$$A = -\frac{\alpha}{2}\left[1 - \sqrt{1 + \frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}\,\right]$$

- $\hat{H}_-$ 的超对称伴侣是 $\hat{H}_+$, 其势能项为:

$$V_+(x) := \frac{1}{2\mu}\left\{\left[W(x)\right]^2 + \hbar\frac{\mathrm{d}W(x)}{\mathrm{d}x}\right\} = \frac{\hbar^2A^2}{2\mu} - \left[\frac{\hbar^2A^2}{\mu} - U_0\right]\mathrm{sech}^2(\alpha x)$$

按照我们选择的参数 A,

$$\begin{aligned}\frac{\hbar^2A^2}{\mu} - U_0 &= \frac{\hbar^2}{\mu}\left(\frac{2\mu U_0}{\hbar^2} - \alpha A\right) - U_0 \\ &= U_0 - \frac{\alpha\hbar^2}{\mu}A \\ &= U_0 + \frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\left[1 - \sqrt{1 + \frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right]\end{aligned}$$

欲使此势能具有形状不变性, 必须保证不等式

$$\hbar^2A^2/\mu > U_0$$

的成立. 显然这不是无条件的, 它要求 $U_0 \gg \alpha^2\hbar^2/8\mu$.

因为

$$A^2=\frac{2\mu U_0}{\hbar^2}-\alpha A=\frac{2\mu U_0}{\hbar^2}+\frac{\alpha^2}{2}\left[1-\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right]$$

我们可以把超对称伴侣 $\hat{H}_\pm$ 的势能项分别表达为：

$$V_-(x,\ U_0)=U_0+\frac{\alpha^2\hbar^2}{4\mu}\left[1-\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right]-U_0\,\mathrm{sech}^2(\alpha x)$$

$$\begin{aligned}V_+(x,\ U_0)=&\ U_0+\frac{\alpha^2\hbar^2}{4\mu}\left[1-\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right]\\&-\left\{U_0+\frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\left[1-\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right]\right\}\mathrm{sech}^2(\alpha x)\end{aligned}$$

令

$$\boxed{U_1=U_0+\frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\left[1-\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right]}$$

显然有 $U_0 > U_1 > 0$ 且不难求得：

$$U_0 = U_1 + \frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\left[1 + \sqrt{1 + \frac{8\mu U_1}{\alpha^2\hbar^2}}\right]$$

由此进一步推论出：

$$\sqrt{1 + \frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}} = 2 + \sqrt{1 + \frac{8\mu U_1}{\alpha^2\hbar^2}} > 2$$

于是我们可以把 $V_+(x,\ U_0)$ 重新表述为：

$$\begin{aligned}
V_+(x,\ U_0) &= U_1 + \frac{\alpha^2\hbar^2}{4\mu}\left[1 + \sqrt{1 + \frac{8\mu U_1}{\alpha^2\hbar^2}}\right] - U_1\,\mathsf{sech}^2(\alpha x) \\
&= U_1 + \frac{\alpha^2\hbar^2}{4\mu}\left[1 - \sqrt{1 + \frac{8\mu U_1}{\alpha^2\hbar^2}}\right] - U_1\,\mathsf{sech}^2(\alpha x) \\
&\quad + \frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\sqrt{1 + \frac{8\mu U_1}{\alpha^2\hbar^2}}
\end{aligned}$$

亦即：

$$\boxed{V_+(x,\ U_0) = V_-(x,\ U_1) + \frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\sqrt{1+\frac{8\mu U_1}{\alpha^2\hbar^2}}}$$

- 考虑到

$$\frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\sqrt{1+\frac{8\mu U_1}{\alpha^2\hbar^2}} > 0$$

上式给出的恰是合乎物理逻辑的形状不变势.

- 注意到

$$\hat{H} = \hat{H}_- - \frac{\hbar^2 A^2}{2\mu} = \hat{H}_- - U_0 - \frac{\alpha^2\hbar^2}{4\mu}\left[1-\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}\right]$$

以及 $\hat{H}_-$ 的基态能量为零，我们看到本例题所考虑的原始量子力学体系的基态能量本征值为：

$$E_0 = -U_0 + \frac{\alpha^2\hbar^2}{4\mu}\left[\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}} - 1\right]$$

显然有 $-U_0 < E_0 < 0$，这是符合物理直觉的.

- 因为

$$
\begin{aligned}
V_+(x,\ U_0) &= V_-(x,\ U_1) + \frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\sqrt{1+\frac{8\mu U_1}{\alpha^2\hbar^2}} \\
&= V_-(x,\ U_1) + \frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\left[\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}-2\right]
\end{aligned}
$$

原始量子力学体系第一激发态的能量本征值为：

$$
\begin{aligned}
E_1 &= E_0 + \frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\left[\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}-2\right] \\
&= -U_0 + \frac{\alpha^2\hbar^2}{4\mu}\left[3\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}-5\right]
\end{aligned}
$$

$\mathcal{Q}$: 怎么确定体系高激发态的能量本征值?

很明显，欲计算原始体系第 $n\ (n \geqslant 1)$ 激发态的能量本征值 E_n，须事先求出 $V_+(x, U_{n-1})$. 前面导出的形状不变势性质

$$V_+(x,\ U_0) = V_-(x,\ U_1) + \frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\sqrt{1+\frac{8\mu U_1}{\alpha^2\hbar^2}}$$

可以改写为：

$$V_+(x,\ U_i) = V_-(x,\ U_{i+1}) + \frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\sqrt{1+\frac{8\mu U_{i+1}}{\alpha^2\hbar^2}}$$

式中 $i = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots$. 常参数 U_i 和 U_{i+1} 的关系表达为：

$$U_i = U_{i+1} + \frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\left[1+\sqrt{1+\frac{8\mu U_{i+1}}{\alpha^2\hbar^2}}\right]$$

故 $U_i > U_{i+1} > 0$. 上式的反变换可写为：

$$U_{i+1} = U_i + \frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\left[1-\sqrt{1+\frac{8\mu U_i}{\alpha^2\hbar^2}}\right]$$

因此，

$$\sqrt{1+\frac{8\mu U_{i+1}}{\alpha^2\hbar^2}}=-2+\sqrt{1+\frac{8\mu U_i}{\alpha^2\hbar^2}},\qquad i=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ \cdots$$

注意到：

$$V_+(x,\ U_{i-1})=V_-(x,\ U_i)+\frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\sqrt{1+\frac{8\mu U_i}{\alpha^2\hbar^2}},\quad i\geqslant 1.$$

原始量子力学体系第 i 与第 $(i-1)$ 个的能量本征值之差为：

$$E_i-E_{i-1}=\frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\sqrt{1+\frac{8\mu U_n}{\alpha^2\hbar^2}}=\frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\left[\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}-2i\right]$$

其第 n 个激发态的能量本征值是：

$$E_n=E_0+\sum_{i=1}^{n}(E_i-E_{i-1})=E_0+\frac{\alpha^2\hbar^2}{2\mu}\left[n\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}}-n(n+1)\right]$$

换言之，

$$E_n = -U_0 + \frac{\alpha^2\hbar^2}{4\mu}\left[(2n+1)\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}} - (2n^2+2n+1)\right]$$

或者[16]：

$$E_n = -\frac{\alpha^2\hbar^2}{8\mu}\left[\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}} - (2n+1)\right]^2$$

因为 $E_n > E_{n-1}$，我们看到本问题所考虑的体系其束缚态是有限的，激发态的数目 n 须受制于不等式：

$$n < \frac{1}{2}\left[\sqrt{1+\frac{8\mu U_0}{\alpha^2\hbar^2}} - 1\right]$$

Q: 请尝试使用超对称量子力学方法求解简谐振子的能量本征值谱.

[16]朗道等，量子力学（中译本），Page 68.

例:

考虑如下一维无限深势阱[17]:

$$V(x) = -\frac{e^2}{x}, \qquad 0 \leqslant x < \infty$$

质量为 μ 的量子力学粒子在此势阱中运动时,其哈密顿算符与能量本征值方程分别为:

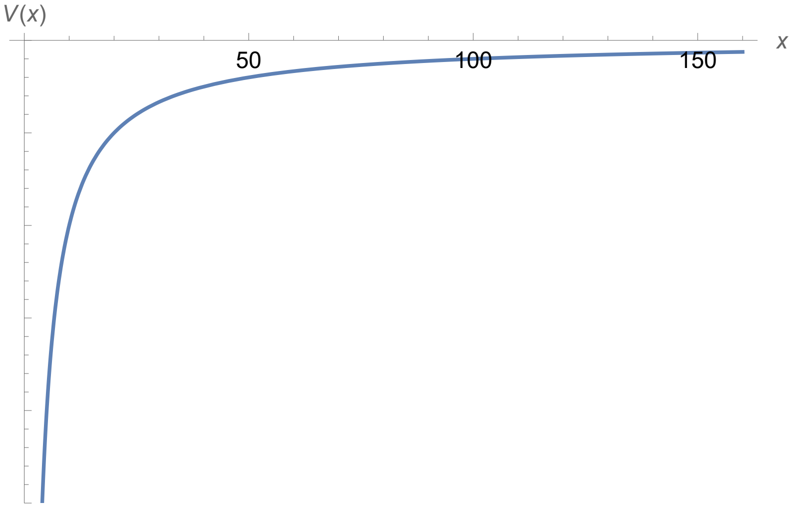
$$\boxed{\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{e^2}{x}, \qquad \hat{H}\psi(x) = E\psi(x)}$$

这是一个一维氢原子模型,它在 $E < 0$ 情形下处于束缚态.

1. **因为势阱深度无限深,体系的束缚态数目是无限多.**
2. 真实的氢原子是一个三维的量子力学体系,其哈密顿算符在位置表象中表达为:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 - \frac{e^2}{r}, \qquad 0 \leqslant r < \infty$$

[17] 曾谨言著,量子力学 II(第四版), Page 367.



$$V(x) = -\frac{e^2}{x}, \quad 0 \leqslant x < \infty$$

现企图使用超对称量子力学方法确定此一维氢原子体系的能量本征值谱. 为此,我们在潜意识中暂把一维氢原子的 $\hat{H}$ 认同为超对称哈密顿伴侣算符中的 $\hat{H}_-$, 按下式定义超势 $W(x)$:

$$\left[W(x)\right]^2-\hbar\frac{\mathrm{d}W(x)}{\mathrm{d}x}=-\frac{2\mu e^2}{x}$$

上式的数学结构暗示:

$$W(x)=\alpha+\frac{\beta\hbar}{x}\quad\rightsquigarrow\quad\boxed{\alpha=\frac{\mu e^2}{\hbar},\quad\beta=-1,\quad\hat{H}_-=\hat{H}+\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}}$$

所以,

$$W(x)=\frac{\mu e^2}{\hbar}-\frac{\hbar}{x}$$

超对称伴侣哈密顿算符 $\hat{H}_\pm$ 中的势能项分别为:

$$V_-(x)=-\frac{e^2}{x}+\frac{\mu e^4}{2\hbar^2},\qquad V_+(x)=-\frac{e^2}{x}+\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}+\frac{\hbar^2}{\mu x^2}$$

顿悟:

1. 因为 $\hat{H}_-$ 的基态能量为零, 故一维氢原子哈密顿算符的最低能量本征值为:
$$E_0 = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} + E_0^{(-)} = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$$
此结果符合氢原子的玻尔能级公式.
2. $\hat{H}_\pm$ 具有相同的非零本征值谱: $E_m^{(-)} = E_{m-1}^{(+)} \quad (m \geqslant 1)$.
3. $V_\pm(x)$ 不构成形状不变势. 这是因为二者具有不同的函数形式.

为绕过此困难求出 $\hat{H}_\pm$ 的本征值谱, 我们引入含实参数 n 的修正库仑势
$$U_-(x,n) = -\frac{e^2}{x} + \frac{\mu e^4}{2\hbar^2(n+1)^2} + \frac{\hbar^2 n(n+1)}{2\mu x^2}, \qquad n \in \mathbb{N}_+$$
使得:
$$V_+(x) = U_-(x,1) + \frac{3\mu e^4}{8\hbar^2}$$

针对 $U_-(x,n)$ 按下式重新定义超势 $W(x,n)$：

$$\left[W(x,n)\right]^2-\hbar\frac{\mathrm{d}W(x,n)}{\mathrm{d}x}=2\mu U_-(x,n)=-\frac{2\mu e^2}{x}+\frac{\mu^2e^4}{\hbar^2(n+1)^2}+\frac{n(n+1)\hbar^2}{x^2}$$

所以，

$$W(x,n)=\frac{\mu e^2}{(n+1)\hbar}-\frac{(n+1)\hbar}{x}$$

进而：

$$\begin{aligned}U_+(x,n)&=\frac{1}{2\mu}\left\{\left[W(x,n)\right]^2+\hbar\frac{\mathrm{d}W(x,n)}{\mathrm{d}x}\right\}\\&=-\frac{e^2}{x}+\frac{\mu e^4}{2\hbar^2(n+1)^2}+\frac{\hbar^2(n+1)(n+2)}{2\mu x^2}\end{aligned}$$

显然，$U_\pm(x,n)$ 形成符合物理诠释的形状不变势：

$$\boxed{U_+(x,n-1)=U_-(x,n)+\frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\left[\frac{1}{n^2}-\frac{1}{(n+1)^2}\right],\quad n\geqslant 2}$$

小结:

1. 因为 $U_-(x,n)$ 所描写体系的基态能量为零 $(n \geqslant 1)$, 故一维氢原子第一激发态的能量本征值为:

$$E_1 = E_0 + \frac{3\mu e^4}{8\hbar^2} = -\frac{\mu e^4}{8\hbar^2}$$

2. $n \geqslant 2$ 情形下, 一维氢原子两个相邻的激发态能级差为[18]:

$$E_{n+1} - E_n = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2}\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2}\right]$$

所以:

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2n^2\hbar^2}$$

综合起来, 以上结果恰为我们预期的氢原子玻尔能级公式.

[18] 切记束缚态下氢原子能量本征值为负, $E_n < 0$.