工程数学

Engineering Mathematics

李小飞 光电科学与工程学院 2022 年 3 月 26 日









1. 薛定谔方程基础

薛定谔方程

分离变量

- 2. 无限深势阱
- 3. 量子谐振子与厄密方程
- 4. 厄密多项式及性质



 薛定谔方程基础 薛定谔方程

分离变量

- 2. 无限深势阱
- 3. 量子谐振子与厄密方程
- 4. 厄密多项式及性质



- 量子力学有关波函数的基本结论
 - · 波函数 业 完全描述体系的状态,
 - ·波函数的模方与粒子出现的概率成比例, $\omega \sim |\Psi|^2$
 - · 波函数的演化服从薛定谔方程: $\hat{E}\Psi=\hat{H}\Psi$

薛定谔方程是量子力学基本方程,与牛顿力学的牛顿第二定理地位相当

万程的建立

■ 可能思路

- 1: 最小作用量原理 $\int\limits_{t_1}^{t_2} \delta L dt = 0$
- 2: 波粒二象性
- 3: 基本假设, 不能从现有理论推导

"It is not possible to derive it from anything you know. It came out of the �� of Schrödinger"

··· R. P. Feynman

☑ 含肘薛定谔方程

标准形式:

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

若取 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ \rightarrow \hat{E} , $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2+V(\vec{r},t)$ \rightarrow \hat{H} 算符形式:

$$\hat{E}~\Psi(\vec{r},t) = \hat{H}~\Psi(\vec{r},t)$$



1. 薛定谔方程基础

薛定谔方程

分离变量

- 2. 无限深势阱
- 3. 量子谐振子与厄密方程
- 4. 厄密多项式及性质



╱ 分离变量

Q 薛定谔方程 $\hat{E}\Psi = \hat{H}\Psi$ 为什么难求解? 因为很难分离变量!

多粒子体系的波函数:

$$\Psi(\vec{r_1},\vec{r_2},...,\vec{r_n},t)$$

多粒子体系的哈密顿量:

$$\hat{H} \; = \sum_{i=1}^n -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_i^2 + \sum_{i=1}^n V(\vec{r_i},t) + \sum_{i,j=1,i\neq j}^n U(\vec{r_i},\vec{r_j})$$

有可能分离变量吗? 条件呢?



□ 分离变量 (1)-> 固有值问题-> 定态薛定谔方程

若势函数 $V(\vec{r},t)$ 不显含时间 t, 时间变量可分离

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

解: 设 $\Psi(\vec{r},t)=\Psi(\vec{r})f(t)$, 代回方程

$$\begin{split} i\hbar\Psi(\vec{r})\frac{\partial}{\partial t}f(t) &= f(t)\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r})\\ i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{\partial}{\partial t}f(t) &= \frac{1}{\Psi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r}) = E \end{split}$$

乃氣方差 水實 求立 得两个微分方程:

1、演化问题 (方程)

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{\partial}{\partial t} f(t) = E$$

解方程, 得: $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$

11、固有值问题 (定态薛定谔方程)

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

算符形式:

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$

哈密顿量决定固有值问题(定态薛定谔方程)求解难度!



☑ 分离变量 (2)-> 单粒子定态薛定谔方程

多粒子体系的定态薛定谔方程:

$$\left[\sum_{i=1}^{n} \hat{H}_{i} + \sum_{i,j=1, i \neq j}^{n} U(\vec{r_{i}}, \vec{r_{j}})\right] \Psi(\vec{r_{1}}, \vec{r_{2}}, ..., \vec{r_{n}}) = E \Psi(\vec{r_{1}}, \vec{r_{2}}, ..., \vec{r_{n}})$$

解: 对于无相互作用体系, 有 $U(\vec{r_i}, \vec{r_j}) = 0$,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{n} (-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_i^2 + V(\vec{r_i})) = \sum_{i=1}^{n} \hat{H}_i \qquad (1)$$

方程可进一步分离变量! 令:

$$\begin{cases} \Psi(\vec{r_1},\vec{r_2},...,\vec{r_n}) = \Psi(\vec{r_1})\Psi(\vec{r_2})...\Psi(\vec{r_n}) & (2) \\ E = E_1 + E_2 + ... + E_n = \sum_{i=1}^n \hat{E}_i & (3) \end{cases}$$
 把 (1) (2) (3) 代回原方程



获得如下方程

$$\sum_{i=1}^n \hat{H}_i \Psi(\vec{r_1}) \Psi(\vec{r_2}) ... \Psi(\vec{r_n}) = \sum_{i=1}^n \hat{E}_i \Psi(\vec{r_1}) \Psi(\vec{r_2}) ... \Psi(\vec{r_n})$$

进一步简化, 得单粒子定态薛定谔方程组

$$\begin{cases} \hat{H}_1\Psi(\vec{r_1}) = E_1\Psi(\vec{r_1}) \\ \hat{H}_2\Psi(\vec{r_2}) = E_2\Psi(\vec{r_2}) \\ \dots \\ \hat{H}_n\Psi(\vec{r_n}) = E_n\Psi(\vec{r_n}) \end{cases}$$



□ 分离变量 (3)-> 一维定态薛定谔方程

单粒子定态薛定谔方程标准型

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(x,y,z)\right]\Psi(x,y,z) = E\Psi(x,y,z)$$

解: 若势函数 $V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$,则 $\hat{H} = \hat{H}(x) + \hat{H}(y) + \hat{H}(z)$ 进一步分离变量:设

$$\Psi(x,y,z) = \Psi_1(x)\Psi_2(y)\Psi_3(z), \qquad E = E_x + E_y + E_z \label{eq:psi_def}$$

代回, 得一维薛定谔方程(组)
$$\begin{cases} \hat{H}(x)\Psi_1(x) = E_x\Psi_1(x) \\ \hat{H}(y)\Psi_2(y) = E_y\Psi_2(y) \\ \hat{H}(z)\Psi_3(z) = E_z\Psi_3(z) \end{cases}$$



如果势函数

$$V(x,y,z) = V(r,\theta,\varphi) = V_1(r) + V_2(\theta) + V_3(\varphi)$$

令

$$\hat{H} = \hat{H}(r) + \hat{H}(\theta) + \hat{H}(\varphi)$$

分离变量得一维薛定谔方程:

$$\begin{cases} \hat{H}(r)\Psi_1(r) = E_r\Psi_1(r) \\ \hat{H}(\theta)\Psi_2(\theta) = E_\theta\Psi_2(\theta) \\ \hat{H}(\varphi)\Psi_3(\varphi) = E_\varphi\Psi_3(\varphi) \end{cases}$$





1. 薛定谔方程基础

2. 无限深势阱

3. 量子谐振子与厄密方程

4. 厄密多项式及性质



● 例 1、一维无限深势阱 |

一粒子处于如下一维无限深势阱,求解含肘薛定谔方程

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ +\infty & x < 0, x > a \end{cases}$$

解:势函数不显含时间 t, 含时薛定谔方程可分离变量, 时间演化方程已求得 (见前), 现求定态薛定谔方程:

$$\begin{cases}
\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + 0 \right] \Psi(x) = E\Psi(x) & 0 < x < a, \\
\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \infty \right] \Psi(x) = E\Psi(x) & x < 0, x > a
\end{cases} (1)$$



方程 (2): 解为 $\Psi(x) = 0$

方程 (1): 令 $k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}$, 方程是如下边值问题:

$$\begin{cases} \Psi''(x) + k^2 \Psi(x) = 0 \\ \Psi(0) = 0 , \ \Psi(a) = 0 \end{cases}$$

特征方程有两虚根,通解为:

$$\Psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$$

取 x = 0, x = a, 代入上式,由零边值条件得:

$$A = 0, \quad \sin ka = 0$$

有:
$$ka = n\pi \rightarrow k = \frac{n\pi}{a} = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar^2}}$$



固有值 (能级): $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2 \mu a^2} (n = 1, 2, 3, ...)$

能级间隔:
$$\triangle E = E_{n+1} - E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2} (2n+1)$$

固有函数:
$$\Psi_n(x) = B_n \sin(\frac{n\pi}{a}x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a}x)$$

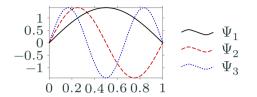
リュー化:
$$\int\limits_{0}^{a}\Psi_{n}^{*}(x)\Psi_{n}(x)dx=\int\limits_{0}^{a}|B_{n}|^{2}\sin^{2}(\frac{n\pi}{a}x)dx=1$$

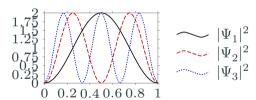
系数:
$$B_n = \sqrt{\frac{2}{a}}$$
 解 (波函数) 为:

解(波函数)为:
$$\int \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(\frac{n\pi}{n}x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt} \quad 0 < \infty$$

$$\Psi_n(x,t) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a}x) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, x > a \end{cases}$$







六氯六基

● 例 2、无限深势阱 ||

设有一粒子处于如下一维无限深势阱中,求解薛定谔方程

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < \frac{a}{2} \\ +\infty & |x| > \frac{a}{2} \end{cases}$$

解: 势函数与上例存在平移关系,令 x' = x + a/2

有:
$$\sin(\frac{n\pi}{a}x') = \sin(\frac{n\pi}{a}(x+a/2))$$

= $\sin\frac{n\pi}{a}x\cos\frac{n\pi}{2} + \cos\frac{n\pi}{a}x\sin\frac{n\pi}{2}$

$$= \sin\frac{n\pi}{a}x\cos\frac{n\pi}{2} + \cos\frac{n\pi}{a}x\sin\frac{n\pi}{2}$$

n 为偶数:
$$E_{2m} = \frac{2m^2\pi^2\tilde{h}^2}{\mu a^2}$$

$$\Psi_{2m}(x) = B_{2m} \sin(\frac{2m\pi}{a}x),$$



n 为奇数:
$$E_{2m+1}=\frac{(2m+1)^2\pi^2\hbar^2}{2\mu a^2}$$

$$\Psi_{2m+1}(x)=B_{2m+1}\cos(\frac{(2m+1)\pi}{a}x),$$

归一化,求系数...

如果把势阱宽改为 2a, 直接求解, 可得:

固有值 (能级):
$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{8\mu a^2} (n=1,2,3,...)$$

固有函数:
$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi}{a}(x+a))$$

比较两种解之间的关系! 明确势阱平移与伸缩后解的写法。



● 例 3、无限深势阱 |||

求解一维无限深势阱的非定常问题

求解一维无限深势阱的非定常问题
$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial^2 x^2}, & (0 < x < L, t > 0) \\ \Psi(0,t) = 0, & \Psi(L,t) = 0 \\ \Psi(x,0) = f(x) \end{cases}$$

解: 令
$$\Psi(x,t) = \Psi(x)T(t)$$
, 代回方程, 得:

$$\begin{cases} \Psi''(x) + k^2 \Psi(x) = 0 \\ \Psi(0) = 0 \;, \;\; \Psi(L) = 0 \end{cases}$$

固有值:
$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu L^2} (n = 1, 2, 3, ...)$$

固有函数:
$$\Psi_n(x) = \sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

时间函数: $T_n(t) = \exp(-iE_n t/\hbar)$

级数解为:
$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \exp(-iE_n t/\hbar) \sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

取 t=0, 代入初值条件, 得:
$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

得系数:
$$B_n = \frac{2}{L} \int_{-\infty}^{L} \sin(\frac{n\pi}{L}x) dx$$
, $(n = 1, 2, 3, ...)$



□作业

1、求定态薛定谔方程

$$\begin{cases} \Psi''(x) + \frac{2\mu E}{\hbar^2} \Psi(x) = 0, & |x| < a/2 \\ \Psi(-a/2) = \Psi(a/2) = 0 \end{cases}$$

2、求解非定常问题

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial^2 x^2}, & (0 < x < L, t > 0) \\ \Psi(0, t) = 0, & \Psi(L, t) = 0 \\ \Psi(x, 0) = f(x) \end{cases}$$

3、求三维无限势阱问题

$$V(x,y,z) = \left\{ egin{array}{ll} 0 \;\;,\;\; 0 < x,y,z < a \\ +\infty,\;\; others \end{array}
ight.$$
 4. 求自由粒子的一维薛定谔方程



- 1. 薛定谔方程基础
- 2. 无限深势阱
- 3. 量子谐振子与厄密方程

相互作用势 量子谐振子方程 厄密方程

4. 厄密多项式及性质



- 1. 薛定谔方程基础
- 2. 无限深势阱
- 3. 量子谐振子与厄密方程

相互作用势

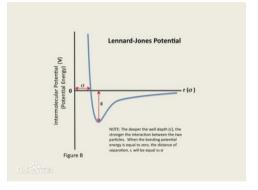
量子谐振子方程 厄密方程

4. 厄密多项式及性质



□ 相互作用势

● 例 1、相互作用势的二阶近似 半经验 Lennard-Jones 势 (如图所示)



实际的相互作用势 V(x) 较 L-J 势更复杂, 试求其在平衡位置附近的二阶近似

解:不管多复杂,在平衡位置 (x=a) 附近可泰勒展开

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

一阶导应为零, 二阶近似可写为

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

取坐标原点为 (a, V_0) , 得:

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



■ 弹性势

弹簧力正是势函数 V(x) 在平衡位置附近的二阶近似

$$F = -\frac{\partial V}{\partial x} = -kx$$

把势函数 V(x) 写成弹性势:

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



- 1. 薛定谔方程基础
- 2. 无限深势阱
- 3. 量子谐振子与厄密方程

相互作用势

量子谐振子方程

厄密方程

4. 厄密多项式及性质



☑ 量子谐振子方程

● 例 2、求解谐振子薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)=[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2}{x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2]\Psi(x,t)$$

解: 令 $\Psi(x,t) = \Psi(x)T(t)$, 代回方程

时间和位置分离变量:

时间函数: $T(t) = \exp(-iEt/\hbar)$

佐置函数满足定态薛定谔方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \right] \Psi(x) = E\Psi(x)$$





整理:

$$\frac{1}{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2} + \left(\frac{2E}{\omega\hbar} - \frac{\mu\omega}{\hbar}x^2\right)\Psi = 0$$

令: $\xi = \alpha x$, 做自变量伸缩变换

$$\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi} \frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}x} = \alpha \frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi}$$
$$\frac{\mathrm{d}\Psi^2}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} (\alpha \frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}\xi}) = \alpha^2 \frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}\xi^2}$$

代回方程,得

$$\left[\frac{\hbar^2\alpha^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi^2} + (E - \frac{\mu\omega^2\xi^2}{2\alpha^2})\right]\Psi(\xi) = 0$$





同除二阶导数项系数,得

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2\alpha^2}(E - \frac{\mu\omega^2\xi^2}{2\alpha^2})\right]\Psi(\xi) = 0$$

令 $\frac{\mu^2 \omega^2}{\hbar^2 \omega^4} = 1$, 得伸缩系数:

$$\alpha^2 = \frac{\mu\omega}{\hbar}$$

引入特征值

$$\lambda = \frac{2E}{\omega\hbar}$$

得二阶常微分方程

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\right]\Psi = 0$$



考虑渐近行为, 当 $|x| \to \infty$, $\xi \to \infty$, 有 $\xi^2 \gg \lambda$, 方程可近似为

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} - \xi^2\right)\Psi = 0$$

方程并无表达式解, 但通过检验平方指数函数的导数

$$\frac{d^2}{d\xi^2} \exp(\frac{\xi^2}{2}) = (\xi^2 + 1) \exp(\frac{\xi^2}{2})$$
$$\frac{d^2}{d\xi^2} \exp(-\frac{\xi^2}{2}) = (\xi^2 - 1) \exp(-\frac{\xi^2}{2})$$



当 $\xi \to \infty$, 这两导数可近似为:

$$(\xi^2) \exp(\frac{\xi^2}{2})$$
, $(\xi^2) \exp(-\frac{\xi^2}{2})$

因此, 极限状态解应与如下函数相关联

$$C_1\exp(\frac{\xi^2}{2})+C_2\exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

考虑到波函数的有界性,应删除发散项 (第一项),得极限状态波函数的简洁形式

$$\Psi_{\infty}(\xi) \sim C_2 \exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

现考虑非极限状态,解函数可写成:

$$\Psi(\xi) = H(\xi)e^{-\xi^2/2}$$

解函数的确定等价于多项式函数 H 的确定。 对上式求导:

$$\Psi'(\xi) = H'(\xi)e^{-\xi^2/2} - H(\xi)\xi e^{-\xi^2/2}$$

$$\Psi''(\xi) = \left[(\xi^2 - 1) H - 2\xi H' + H'' \right] e^{-\xi^2/2}$$
 Then
$$d^2\Psi$$

代回原方程 $\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\Psi = 0$

得关于多项式 $H(\xi)$ 的方程:

$$H'' - 2\xi H' + (\lambda - 1)H = 0$$

取 $\lambda - 1 = 2n$, 方程转化为 n 阶厄密方程

$$H'' - 2\xi H' + 2nH = 0$$

由

$$\lambda = 2n + 1 = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

解出能量固有值(能级)

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad (n = 0, 1, 2, \dots)$$

固有函数由 N 阶厄密方程给出.....



- 1. 薛定谔方程基础
- 2. 无限深势阱
- 3. 量子谐振子与厄密方程

相互作用势量子谐振子方程

厄密方程

4. 厄密多项式及性质



╱ 厄密方程

● 例 3、求解 n 阶厄密方程

$$H'' - 2\xi H' + 2nH = 0$$

解: 幂级数方法求解, 令:

$$H = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k$$

求一阶导和二阶导, 代回厄密方程, 可得系数递推式:

$$c_{k+2} = \frac{2(k-n)}{(k+2)(k+1)}c_k, \quad (k=0,1,2,3,\ldots)$$



分偶数阶和奇数阶写

$$c_{2m} = (-1)^m \frac{2^m n(n-2)(n-4)...(n-2m+2)}{(2m)!} c_0$$

显然有 $c_{2m} = 0$, (2m > n)

$$c_k = (-1)^m \frac{2^m n !!}{k!} c_0, \quad (2m = k)$$

$$c_{2m+1} = (-1)^m \frac{2^m (n-1)(n-3)(n-5)...(n-2m+1)}{(2m+1)!} c_1$$

显然有
$$c_{2m+1} = 0$$
 , $(2m+1 > n)$

$$c_{2m+1} = 0$$
, $(2m+1 > n)$

$$c_k = (-1)^m \frac{2^m n!!}{k!} c_1, \quad (2m+1=k)$$

光 ボ

所有系数求得, 幂级数得解

$$\begin{cases} y_1(\xi) = [1 - \frac{2n}{2!}\xi^2 + \frac{2^2n(n-2)}{4!}\xi^4 - \ldots] \\ \\ y_2(\xi) = [\xi - \frac{2(n-1)}{3!}\xi^3 + \frac{2^2(n-1)(n-3)}{5!}\xi^5 - \ldots] \\ \\ \text{n. 阶压密方程的解:} \end{cases}$$

$$H(\xi) = c_0 y_1(\xi) + c_1 y_2(\xi).$$

量子谐振子方程的解:

$$\Psi(\xi) = [c_0 y_1(\xi) + c_1 y_2(\xi)]e^{-\xi^2/2}$$

根据波函数的有界性性质,H 应取多项式 (不能为无穷级数)。当 N 为偶数时, $c_1=0$,当 N 为奇数时, $c_0=0$ 。待定系数由定解条件给出…

为了更好地描述,将系数递推式降幂排列,现令最高次项系数为:

$$c_n = 2^n$$

系数递推式可写为:

$$\begin{split} c_{k-2} &= -\frac{k(k-1)}{2(n-k+2)} c_k \\ c_{n-2} &= -\frac{n(n-1)}{2\times 2} c_n \\ c_{n-4} &= (-1)^2 \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2\times 2\times 4} 2^n \\ c_{n-2m} &= (-1)^m \frac{n!}{2^m (2m)!! (n-2m)!} 2^n = (-1)^m \frac{n!}{m! (n-2m)!} 2^{n-2m} \end{split}$$

3/1

厄密方程的解为厄米多项式:

$$H(\xi) = \sum_{m=0}^{M} (-1)^m \frac{n!}{m!(n-2m)!} 2^{n-2m} \xi^{n-2m}, \quad M = [n/2]$$

量子谐振子的解为

$$\Psi_n(\xi) = N_n \exp(-\frac{\xi^2}{2}) H(\xi)$$

归一化解: (...)

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

定态波函数为

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

♬作业:

1、计算积分

$$\int_{0}^{+\infty} e^{-x^2/2} dx$$

- 2、 根据厄米多项式表达式,写出前五个厄米多项式,并分析 $H_n'(x)$ 与 $H_{n-1}(x)$ 之间的联系
- 3、求解厄米方程

$$\frac{d^2H}{dx^2} - 2x\frac{dy}{dx} + 4nH = 0$$

4、 列出厄米方程的几种形式,说明厄米方程的特点





- 1. 薛定谔方程基础
- 2. 无限深势阱
- 3. 量子谐振子与厄密方程

4. 厄密多项式及性质

生成函数

性质

归一化系数



4. 厄密多项式及性质

生成函数

性质

归一化系数

- 1. 薛定谔方程基础
- 2. 无限深势阱
- 3. 量子谐振子与厄密方程





ℚ 例 1、求厄密多项式的生成函数 找一个函数,它的展开系数刚好就是 Hermite 多项式

$$w(x,t) = e^{2xt - t^2}$$

试证明,上述二元函数就是 Hermite 多项式的一个母函数

解: 把函数做关于变量 t 的 Taylor 展开:

$$w(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} c_n(x) t^n$$

需证明:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + 2n\right]c_n(x) = 0$$



证明: 1)、由 $\frac{\partial w}{\partial x} = 2te^{2xt-t^2} = 2t \ w(x,t)$,得

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} c'_n(x) t^n = 2t \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} c_n(x) t^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} 2c_n(x) t^{n+1}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} 2nc_{n-1}(x) t^n$$

比较系数,有:

$$c_n'(x) = 2nc_{n-1}(x)$$

$$c\ ''_n(x) = 2nc\ '_{n-1}(x) = 4n(n-1)c_{n-2}(x)$$

2) 由
$$\frac{\partial w}{\partial t}=2(x-t)e^{2xt-t^2}=2(x-t)\;w(x,t)$$
,得
$$\frac{\partial w}{\partial t}+2(t-x)\;w(x,t)=0$$
 把展开式代入上式

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} n c_n(x) t^{n-1} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} 2(t-x) c_n(x) t^n = 0$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} n c_n(x) t^{n-1} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-2x}{n!} c_n(x) t^n + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2}{n!} c_n(x) t^{n+1} = 0$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} c_{n+1}(x) t^n + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{-2x}{n!} c_n(x) t^n + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n}{n!} c_{n-1}(x) t^n = 0$$



比较系数,有:

$$c_{n+1}(x) - 2xc_n(x) + 2nc_{n-1}(x) = 0 \\$$

$$c_n(x) - 2xc_{n-1}(x) + 2(n-1)c_{n-2}(x) = 0$$

3) 把 (1) 中得到的结论

$$c_n'(x) = 2nc_{n-1}(x)$$

$$c_{n}''(x) = 4n(n-1)c_{n-2}(x)$$

代入 (2) 中得到的结论, 得:

$$c_n(x) - \frac{x}{n} c \, {}'_n(x) + \frac{1}{2n} c \, {}''_n(x) = 0$$

整理为:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + 2n\right]c_n(x) = 0$$

证毕!

即有:
$$c_n(x) = H_n(x)$$

4. 厄密多项式及性质

生成函数

性质

归一化系数

- 1. 薛定谔方程基础
- 2. 无限深势阱
- 3. 量子谐振子与厄密方程



☑ 递推公式

既然:
$$c_n(x) = H_n(x)$$

$$c'_n(x) = 2nc_{n-1}(x)$$

$$\rightarrow H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x)$$

$$c_n(x) - 2xc_{n-1}(x) + 2(n-1)c_{n-2}(x) = 0$$

$$\rightarrow H_n(x) - 2xH_{n-1}(x) + 2(n-1)H_{n-2}(x) = 0$$
 有: $H_0(x) = 1, H_1(x) = 2x,$



╱ 微分形式

$$\begin{split} w(x,t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} c_n(x) t^n, \qquad w(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(x) t^n \\ & \text{ Haylor 及式,知:} \\ H_n(x) &= \left[\frac{\partial^n w}{\partial t^n} \right]_{t=0} \\ &= e^{x^2} \left[\frac{\partial^n}{\partial t^n} e^{-(x-t)^2} \right]_{t=0} \\ &= (-1)^n e^{x^2} \left[\frac{d^n}{d u^n} e^{-u^2} \right]_{u=x} \\ H_n(x) &= (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{d x^n} e^{-x^2} \end{split}$$

□正交性

ℚ 例 2、证明厄密多项式正交性

是带权函数 $(\rho(x) = exp(-x^2))$ 的正交函数系:

$$\begin{cases} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_m(\xi) H_n(\xi) d\xi &= 0 \\ \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_n(\xi) d\xi &= 2^n n! \sqrt{\pi} \end{cases}$$

证明: 谐振子方程:
$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\Psi = 0$$

代入
$$\lambda = 2n+1$$

$$\rightarrow \Psi_n'' + (2n+1-\xi^2)\Psi_n = 0$$

解为:
$$u_n(x) = H_n(\xi)e^{-\xi^2/2}$$
, 代回方程, 得:



$$u_n'' + (2n+1-\xi^2)u_n = 0 \; , \; u_m'' + (2m+1-\xi^2)u_m = 0$$

$$\begin{split} u_m u_n'' + (2n+1-\xi^2) u_m u_n &= 0 \\ u_n u_m'' + (2n+1-\xi^2) u_n u_m &= 0 \end{split}$$

$$u_mu_n''-u_nu_m''+2(n-m)u_nu_m=0$$

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} [u_m u_n'' - u_n u_m''] d\xi$$

$$[u_m u_n'' - u_n u_m'']$$

因此 $2(n-m)\int u_n u_m d\xi=0$

 $= [u_m u_n'' - u_n u_m'']|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} [u_m' u_n' - u_n' u_m'] d\xi = 0$

由递推公式:

$$\begin{split} &H_n - 2xH_{n-1} + 2(n-1)H_{n-2} = 0 \\ &=> H_n^2 - 2xH_nH_{n-1} + 2(n-1)H_nH_{n-2} = 0 \end{split}$$

$$\begin{split} &H_{n+1} - 2xH_n + 2nH_{n-1} = 0 \\ &\Rightarrow H_{n+1}H_{n-1} - 2xH_nH_{n-1} + 2nH_{n-1}^2 = 0 \end{split}$$

两次相减

$$H_n^2(\xi) - H_{n+1}H_{n-1} = 2nH_{n-1}^2(\xi) - 2(n-1)H_nH_{n-2}$$

乘以权重函数再积分, 得积分递推式:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 2n \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_{n-1}^2(\xi) d\xi$$



$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 2n \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_{n-1}^2(\xi) d\xi$$

$$= 2n \times 2(n-1) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_{n-2}^2(\xi) d\xi$$

$$= 2n \times 2(n-1)...(2(n-n)) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_0^2(\xi) d\xi$$

$$= 2^n n! \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_0^2(\xi) d\xi$$

$$= 2^n n! \int_{+\infty}^{-\infty} e^{-\xi^2} d\xi$$

$$= 2^n n! \sqrt{\pi}$$

46/53

4. 厄密多项式及性质

生成函数

性质

归一化系数

- 1. 薛定谔方程基础
- 2. 无限深势阱
- 3. 量子谐振子与厄密方程



固有解为

$$\begin{split} \Psi_n(\xi) &= N_n \exp(-\frac{\xi^2}{2}) H(\xi) \\ \int\limits_{-\infty}^{+\infty} [N_n \exp(-\frac{\xi^2}{2}) H(\xi)]^2 d\xi &= N_n^2 2^n n! \sqrt{\pi} = 1 \\ N_n &= \frac{1}{(2^n n! \sqrt{\pi})^{1/2}} \end{split}$$

お気が

归一化固有函数:

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

定态波函数:

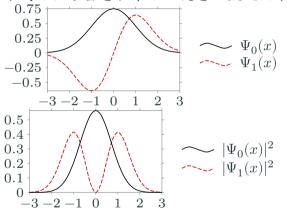
$$\begin{split} &\Psi_n(x,t)=\Psi_n(x)e^{-\frac{i}{\hbar}E_nt}\\ &=\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^nn!}\right)^{1/2}e^{-a^2x^2-\frac{i}{\hbar}E_nt}H_n(\alpha x)\\ &\triangleq \hbar \circ \text{解} : \end{split}$$

叠加解:

$$\Psi(x,t) = \sum a_n \Psi_n(x,t)$$



下图给出了基态和第一激发态函数及概率分布



八氣 六為





求处于如下势场:

$$V(x) = \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 + \mu$$

中粒子的能量固有值和定态波函数。



□作业

1、将函数
$$f(x) = x^3 + 2x^2 + 1$$
 按厄米多项式展开

参考答案:
$$f(x) = \frac{1}{8}H_3 + \frac{1}{2}H_2 + \frac{3}{4}H_1 + 2H_0$$

- 2、写出厄米多项式的递推公式,并求 $H_n(0), H_n'(0), H_n(1), H_n'(1)$
- 3、求解如下初值问题

$$\begin{cases} i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\mu\omega^2x^2 \right]\Psi\\ \Psi(x,0) = \psi(x) \end{cases}$$





4、电荷为 q 的谐振子,受到沿 X 方向的外电场 ξ 的作用时,其势场为:

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

求解其能量固有值和定态波函数。(移轴法)

八氣六萬 水實 求真



薛定谔方程的数值解法: Matlab or Python or VASP

六氣六為



Thanks for your attention!

A & Q

