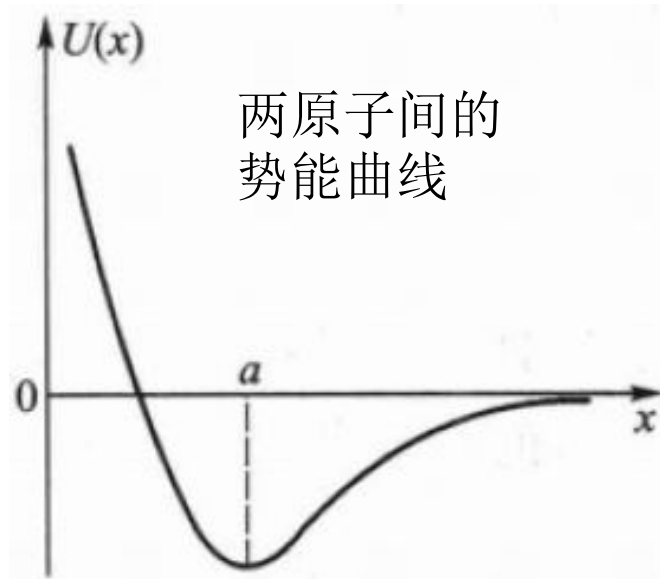


线性谐振子

谐振子问题在量子力学中非常重要

辐射场问题可以看成是无穷多谐振子的集合（量子场论）；
固体中的晶格振动；原子核的表面振动；等等

谐振子往往可以看成是各种复杂运动的初级近似



线性谐振子的势能函数是：

$$U(x) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2, \quad \omega: \text{谐振子的固有圆频率}$$

定态Schrödinger方程是：

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

在方程中做如下的无量纲化变换：

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} x \equiv \alpha x, \\ \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \end{array} \right. \quad \left(\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \right)$$

检查量纲

得：

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

束缚态的解的要求：

$$\psi(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0$$

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

$\xi \rightarrow \pm\infty$ 方程近似为: $\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi$

它有近似解: $\psi(\xi) \sim e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}$ $e^{+\xi^2/2}$ 应舍去

再进行变换: $\psi(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2} H(\xi)$

得**Hermite方程**: $\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0$

Hermitian多项式

可以用级数解法求 $H(\xi)$, 即令

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

$k < 0$ 可以吗?

代入方程中得

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)c_k \xi^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} (2k+1-\lambda)c_k \xi^k = 0$$

系数 $\{c_k\}$ 必须满足递推公式

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

可以证明：如果 $H(\xi)$ 是真无穷级数，
也就是 $k \rightarrow \infty$ 时 $c_k \neq 0$ ，
那么在 $x \rightarrow \pm \infty$ 的时候 $H(\xi)$ 就 $\rightarrow e^{\xi^2}$ ，

仍然使 $\psi(\xi)$ 发散

能够避免这种情形出现的唯一出路是级数“中止”或“退化”
为多项式，而这这就要求

(1) λ 只能取一些特殊的值： $2k+1$

(2) 多项式展开项的幂次 k 要么全是奇数，要么全是偶数

设要求 $H(\xi)$ 是 ξ 的 n 次多项式, 则必须让

那么 $c_n \neq 0$ 而 c_{n+2} 要 $= 0$, 而且只能出现奇数或偶数幂

所以 $\lambda = 2n + 1, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$

首先得到了能量本征值:

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

其次, $H(\xi)$ 的方程化为: $\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0.$

而不难验证下面的函数正满足以上的方程：

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}.$$

注：严格的数学推导请见曾谨言书附录或数理方法

它称为 n 次 $Hermitian$ 多项式。头三个 $Hermitian$ 多项式是：

$$H_0(\xi) = 1,$$

$$H_1(\xi) = 2\xi,$$

$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2.$$

线性谐振子的能级和波函数

能级是：

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

对应的波函数是：

$$\psi_n(x) = N_n H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = N_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \cdot \left(\alpha = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}} \right)$$

$$N_n \text{ 是归一化常数, } \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1$$

利用Hermitian多项式的正交归一公式：

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

$$\text{则归一化常数为: } N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}.$$

最低几个能级的波函数为：

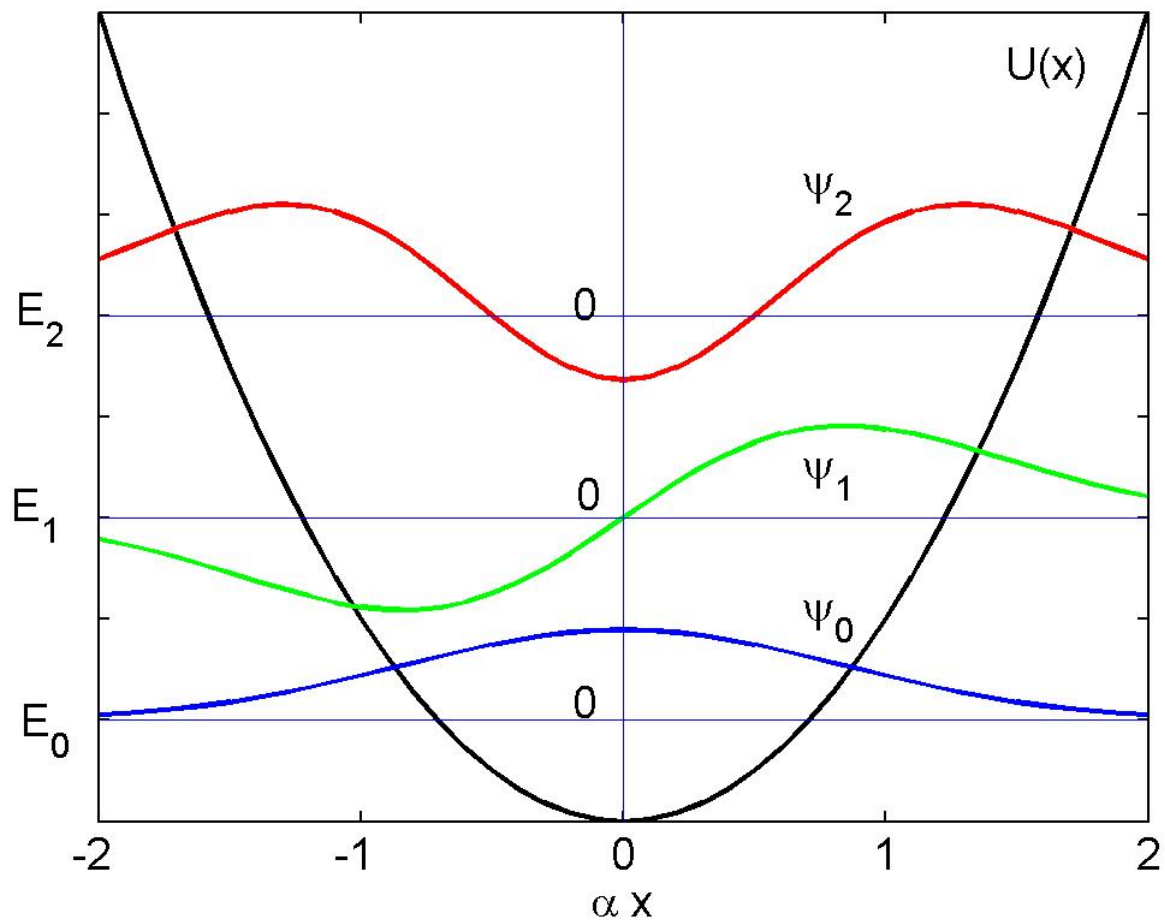
$$\psi_0(x) = \frac{\sqrt{\alpha}}{\pi^{1/4}} \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$$

$$\psi_1(x) = \frac{\sqrt{2\alpha}}{\pi^{1/4}} \alpha x \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$$

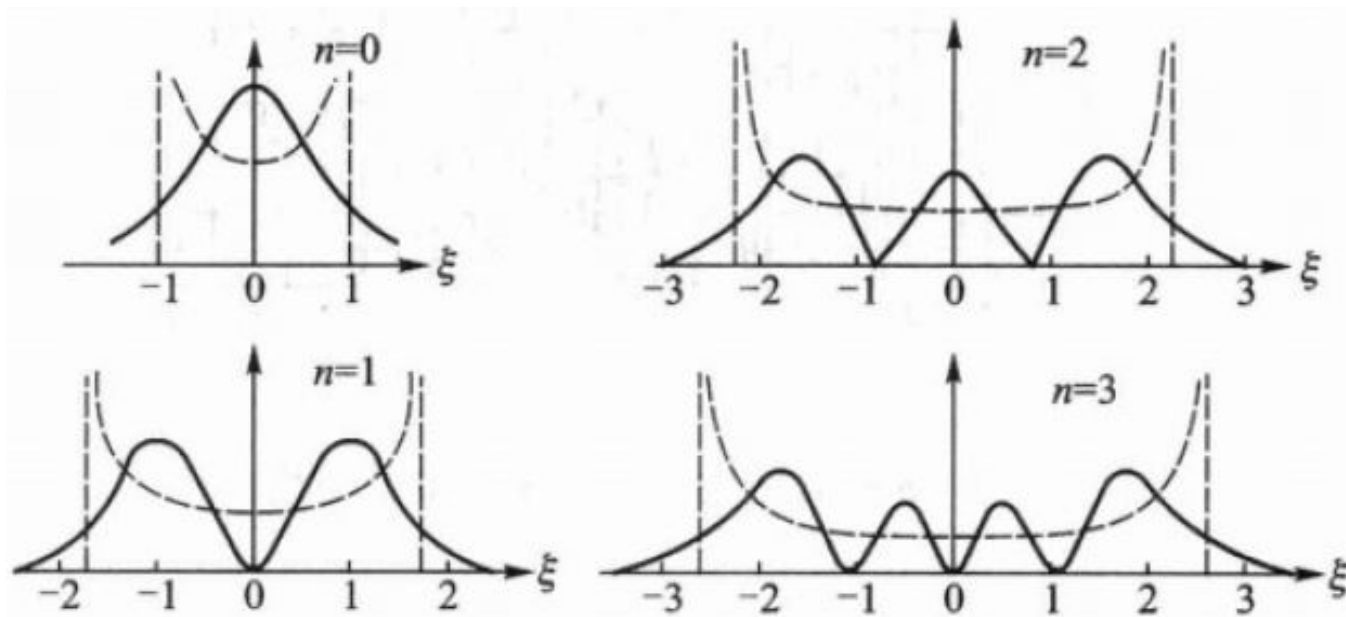
$$\psi_2(x) = \frac{\sqrt{\alpha/2}}{\pi^{1/4}} (2\alpha^2 x^2 - 1) \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2\right)$$

n 的奇偶性决定了谐振子波函数的奇偶性，即宇称的奇偶

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



粒子具有一定的概率处在经典允许区之外



经典情况:

实线(虚线)表示谐振子在量子(经典)情况下的概率密度分布

$$\xi = a \sin(\omega t + \delta)$$

$$v = \dot{\xi} = a\omega \cos(\omega t + \delta) = a\omega \left(1 - \frac{\xi^2}{a^2}\right)^{1/2}$$

$$w(\xi) \propto \frac{1}{v} \propto \left(1 - \frac{\xi^2}{a^2}\right)^{-1/2}$$

根据 $E = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$, $U = \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2$ 以及 $\xi = \sqrt{\frac{\mu \omega}{\hbar}} x$, 得 ξ 的经典最大值是

- ☒ A $\sqrt{2n+1}$ 。
- ☐ B $\frac{\sqrt{2n+1}}{\hbar}$ 。
- ☐ C $\sqrt{2(n+1)}$ 。
- ☐ D $n+1$ 。

提交

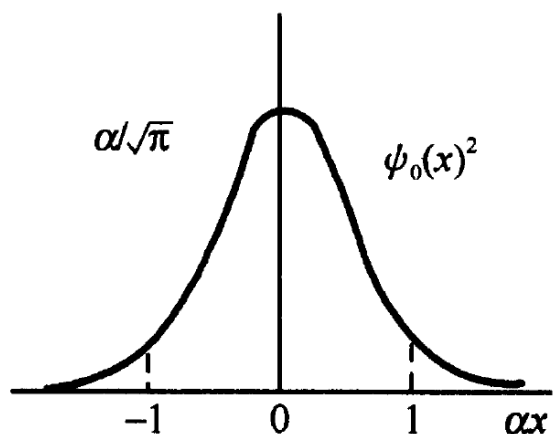
对于基态能量，按照经典力学，粒子将被限制在

$$|\alpha x| \leq 1$$

的范围内 在 $|\alpha x|=1$ 处，势能为 $U = \frac{1}{2} \hbar \omega$

则此时粒子的动能为0。

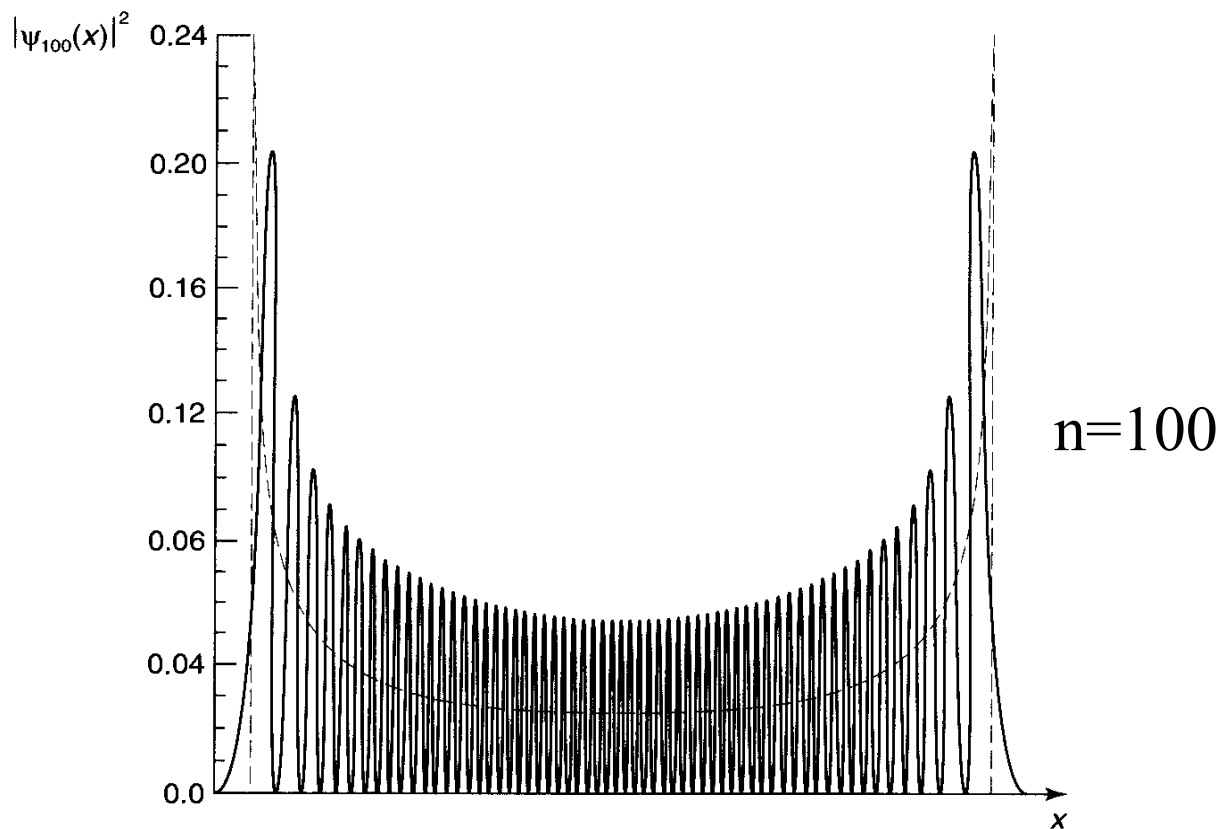
但是按照量子力学的计算，粒子则有一定的概率出现在经典允许区之外。对于基态，这一概率为：



$$\frac{\int_{-1}^{1} e^{-\xi^2} d\xi}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi} = 16\%$$

这是一种量子效应，在基态表现得最为明显。随着能量的增加（即 n 的增加），谐振子的位置概率分布将逐渐趋于经典谐振子的概率分布

对应原理（Bohr）：在大量子数极限下，量子理论趋近于经典理论



讨论：

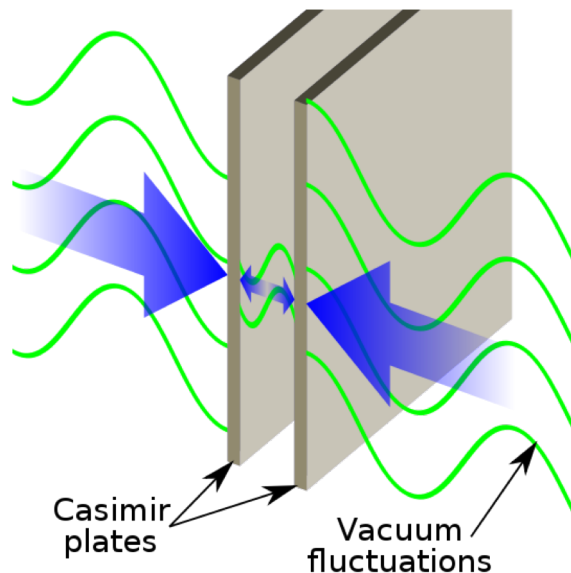
(1) n 较大时能谱连续：
$$\frac{\Delta E_n}{E_n} \equiv \frac{E_{n+1} - E_n}{E_n} = \frac{1}{n + 1/2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

(2) n 较小时，量子效应明显。比如在 $n=0$ 时，量子力学告诉我们粒子在 $\xi=0$ 处出现几率最大，但在经典力学中，粒子在此处速度极大，出现几率最小

(3) n 较大时，空间几率趋于经典分布（量子态 n 对应的典运动振幅为 $a = \sqrt{2n + 1}$ ）

(4) 在 $\xi > a$ 的经典力学粒子不能达到的区域，量子世界中仍有分布 – 不确定性原理，隧道效应

(5) 同势阱问题一样，振子基态能量(零点能)不为0 ($E_0 = \hbar\omega/2$)。零点能的实验解释：Casimir效应



(6) 由于谐振子势有空间反射不变性，所以有确定的宇称。能级的宇称偶奇相间，基态是偶宇称

(7) $\Psi_n(x)$ 有 n 个节点

一维散射问题

为简单可以假设

$$U(+\infty) = U(-\infty) = 0, \quad E > 0.$$

所以这时的量子状态是非束缚态，也就是散射态

在 $x \rightarrow \pm\infty$ 时 $U = 0$,

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

$\psi(x) = e^{ikx}$ 和 e^{-ikx} 的线性组合.

e^{ikx} 是正向行波, e^{-ikx} 是反向行波

实际情况是：粒子从一边入射，被势场散射而分成了反射和透射两个部分。这给方程提出了一定的条件

下面以左方入射为例，边界条件是：

$$x \rightarrow -\infty, \psi(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}, \quad (\text{入射加反射})$$

$$x \rightarrow +\infty, \psi(x) = C e^{ikx}. \quad (\text{只有透射})$$

在 $\psi = A e^{ikx}$ 时，粒子的几率流密度是：

$$\begin{aligned} J &= \frac{i\hbar}{2\mu} \left(\psi \frac{d\psi^*}{dx} - \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right) \\ &= |A|^2 \frac{\hbar k}{\mu} = |A|^2 v, \end{aligned}$$

$v = \hbar k / \mu = p / \mu$ 是粒子的经典速度。

设 $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ ，则粒子流密度为

- ☐ A $(|A|^2 - |B|^2 + 2|A||B|)v$ 。
- ☐ B $(|A|^2 + |B|^2)v$ 。
- ☒ C $(|A|^2 - |B|^2)v$ 。
- ☐ D $(|B|^2 - |A|^2)v$ 。
- ☐ E 上面答案都不是。

提交

入射几率流密度是 $J_I = |A|^2 v$,

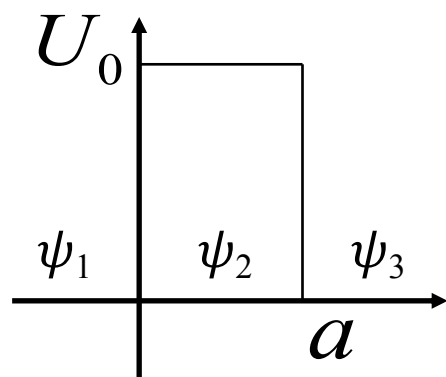
反射几率流密度是 $J_R = |B|^2 v$,

透射几率流密度是 $J_D = |C|^2 v$,

由此定义： 反射系数 $R = \frac{J_R}{J_I} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$,

透射系数 $D = \frac{J_D}{J_I} = \frac{|C|^2}{|A|^2}$.

方势垒的穿透



方势垒是：

$$U(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \text{ or } x > a \\ U_0(> 0). & 0 < x < a \end{cases}$$

定态薛定谔方程可写为（先考虑 $E > U_0$ ）

$$\begin{cases} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0, & (x < 0, x > a) \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0) \psi = 0, & (0 < x < a) \end{cases}$$

参考一维势阱问题的解,本问题的解就容易得到:

$$\psi_1 = Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} \quad \text{其中用到了简写(先假设 } E > U_0 \text{):}$$

$$\psi_2 = Be^{ik_2x} + B'e^{-ik_2x}$$

$$\psi_3 = Ce^{ik_1x} + \cancel{C'e^{-ik_1x}}$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$$

表达式中第一项(第二项)代表从左向右(从右向左)传播的平面波。在 $x > a$ 的区域只有向右的透射波，所以 $C' = 0$

利用波函数及其导数在边界处的连续性,得出波函数中各系数的关系式:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A + A' = B + B'$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \Rightarrow k_1 A - k_1 A' = k_2 B - k_2 B'$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \Rightarrow Be^{ik_2 a} + B'e^{-ik_2 a} = Ce^{ik_1 a}$$

$$\psi_2'(a) = \psi_3'(a) \Rightarrow k_2 Be^{ik_2 a} - k_2 B'e^{-ik_2 a} = k_1 Ce^{ik_1 a}$$

解这一组方程, 把 A' 、 C 表示为 A 的函数。

线性方程组的解法?

利用波函数及其导数在边界处的连续性,得出波函数中各系数的关系式:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A + A' = B + B' \quad (1)$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \Rightarrow k_1 A - k_1 A' = k_2 B - k_2 B' \quad (2)$$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \Rightarrow B e^{ik_2 a} + B' e^{-ik_2 a} = C e^{ik_1 a} \quad (3)$$

$$\psi_2'(a) = \psi_3'(a) \Rightarrow k_2 B e^{ik_2 a} - k_2 B' e^{-ik_2 a} = k_1 C e^{ik_1 a} \quad (4)$$

(1)(2)得

$$\begin{cases} B = \frac{1}{2}A \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) + \frac{1}{2}A' \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \\ B' = \frac{1}{2}A \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) + \frac{1}{2}A' \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \end{cases}$$

(3)(4)得

$$\begin{cases} B = \frac{1}{2}C e^{i(k_1 - k_2)a} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \\ B' = \frac{1}{2}C e^{i(k_1 + k_2)a} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \end{cases}$$

(1)(2)得

$$\begin{cases} B = \frac{1}{2}A\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) + \frac{1}{2}A'\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \\ B' = \frac{1}{2}A\left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) + \frac{1}{2}A'\left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \end{cases}$$

(3)(4)得

$$\begin{cases} B = \frac{1}{2}C e^{i(k_1 - k_2)a} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \\ B' = \frac{1}{2}C e^{i(k_1 + k_2)a} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \end{cases}$$

消去B、B'得

$$\begin{cases} e^{i(k_1 - k_2)a} \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) C - \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) A' = A \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) \\ e^{i(k_1 + k_2)a} \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) C - \left(1 + \frac{k_1}{k_2}\right) A' = A \left(1 - \frac{k_1}{k_2}\right) \end{cases}$$

解这一组方程，得：

$$\begin{cases} A' = \frac{2i(k_1^2 - k_2^2) \sin k_2 a}{(k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a} - (k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a}} A \\ C = \frac{4k_1 k_2 e^{-ik_1 a}}{(k_1 + k_2)^2 e^{-ik_2 a} - (k_1 - k_2)^2 e^{ik_2 a}} A \end{cases}$$

计算入射波(A项), 反射波(A'项)和透射波(C项)的概率流密度得:

$$J_{in} = \frac{\hbar k_1}{m} |A|^2, \quad J_R = -\frac{\hbar k_1}{m} |A'|^2, \quad J_D = \frac{\hbar k_1}{m} |C|^2$$

接着可以得到粒子的反射系数和透射系数:

$$R \equiv \left| \frac{J_R}{J_{in}} \right| = \left| \frac{A'}{A} \right|^2 = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2}$$
$$D \equiv \left| \frac{J_D}{J_{in}} \right| = \left| \frac{C}{A} \right|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2}$$

很容易看出 $R+D=1$, 这是粒子流密度守恒的必然结果

以上讨论的是 $E > U_0$ 的情形,没有什么与经典力学不同的结果。下面讨论 $E < U_0$ 的情形,在经典情况下,根据能量守恒,粒子没有足够的动能穿过势垒,量子情况下如何?

$E < U_0$ 情形下, k_2 是虚数:

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} = ik_3, \quad k_3 = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$$

原来:

$$D = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2}$$

现在:

$$D = \frac{-4k_1^2 k_3^2}{(k_1^2 + k_3^2)^2 \sin^2 ik_3 a - 4k_1^2 k_3^2}$$

$\sin(i\theta)$ 可化为下面哪个式子?

- A $i \sin \theta$ 。
- B $i \cos \theta$ 。
- ☒ C $i \frac{e^{\theta} - e^{-\theta}}{2}$ 。
- D $i \frac{e^{\theta} + e^{-\theta}}{2}$ 。

提交

以上讨论的是 $E > U_0$ 的情形,没有什么与经典力学不同的结果。下面讨论 $E < U_0$ 的情形,在经典情况下,根据能量守恒,粒子没有足够的动能穿过势垒,量子情况下如何?

$E < U_0$ 情形下, k_2 是虚数,令 $k_2 = ik_3$,则

$$D = \frac{4k_1^2 k_3^2}{(k_1^2 + k_3^2)^2 \sinh^2 k_3 a + 4k_1^2 k_3^2} > 0$$

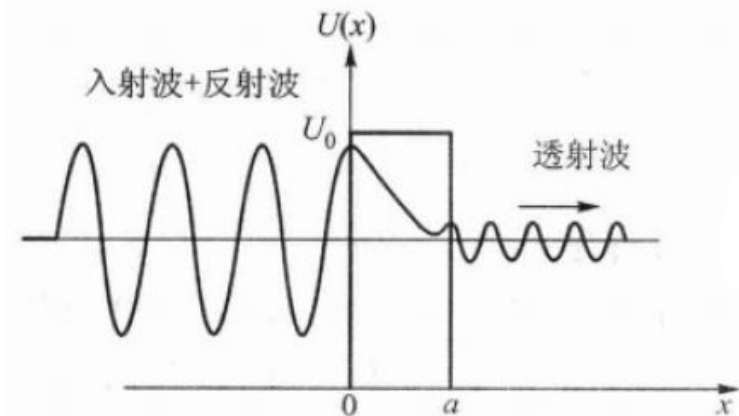
双曲正弦函数:

$$\sinh x \equiv \frac{e^x - e^{-x}}{2}$$

当 U_0 很大时时, $k_3 a \gg 1$, 透射系数可近似为:

$$\begin{aligned} D &= D_0(k_1, k_3) e^{-2k_3 a} \\ &= D_0(k_1, k_3) e^{-\frac{2}{\hbar} a \sqrt{2m(U_0 - E)}} \end{aligned}$$

$E < U_0$ 时 $D > 0 \rightarrow$ 量子隧道效应



以电子的隧道效应为例,计算透射系数数量级. 从 $m_e=0.511$ MeV/c², $hc=1973$ eV·Å, $U_0-E=5$ eV, 对应不同势垒宽度的透射系数的数量级为:

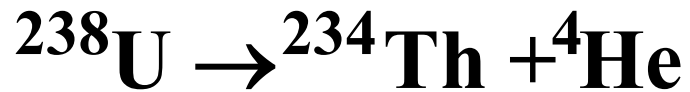
a(Å)	1.0	2.0	5.0	10.0
D	0.101	1.02×10^{-2}	1.06×10^{-5}	1.12×10^{-10}

理解量子隧道效应 – 在势垒内部,根据总能量守恒,粒子的动能将变为负数:

$$E_{kin} = E - U_0 < 0$$

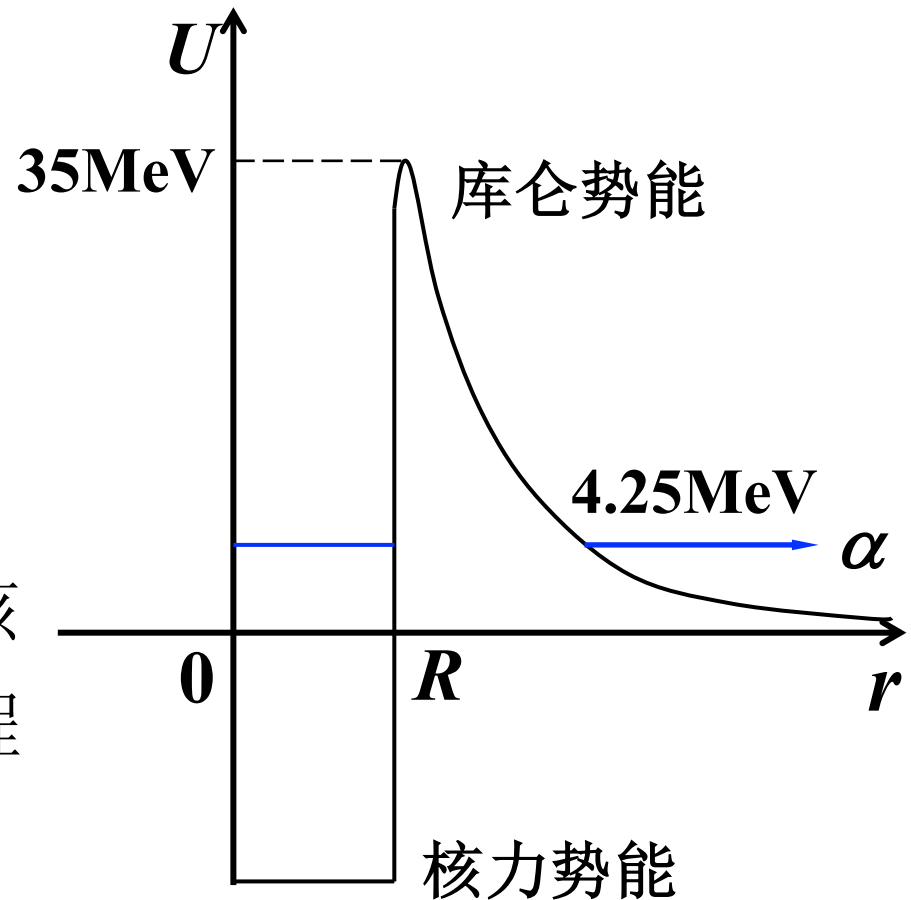
这在经典力学中是不可能的.在量子力学里,粒子动能算符与势能算符不对易,两者不能同时具有确定值.而且,力学量的平均值是一个全域的积分平均,在某个局域内讨论是没有意义的.一旦讨论限制在某一局域(势垒内部),粒子动量就在某一范围内不确定.

重原子核 α 衰变中的隧道效应:

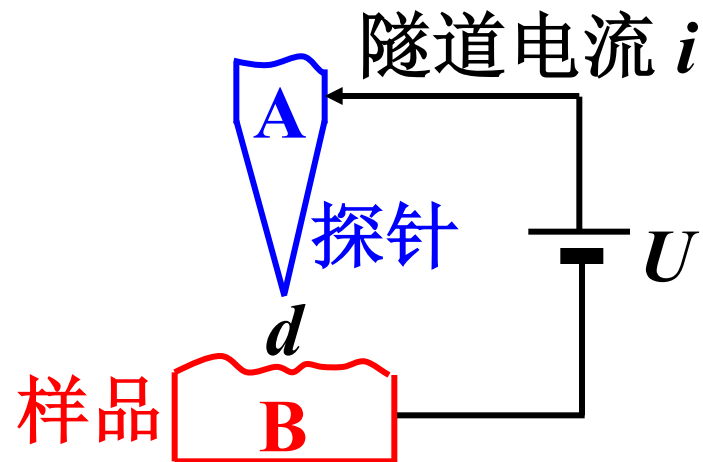


$$E_{\alpha} = 4.25 \text{ MeV}$$

α 粒子与剩余核子之间既有库仑力(排斥力),又有核力(吸引力).库仑力是长程力,核力是短程力.



扫描隧道显微镜(STM):

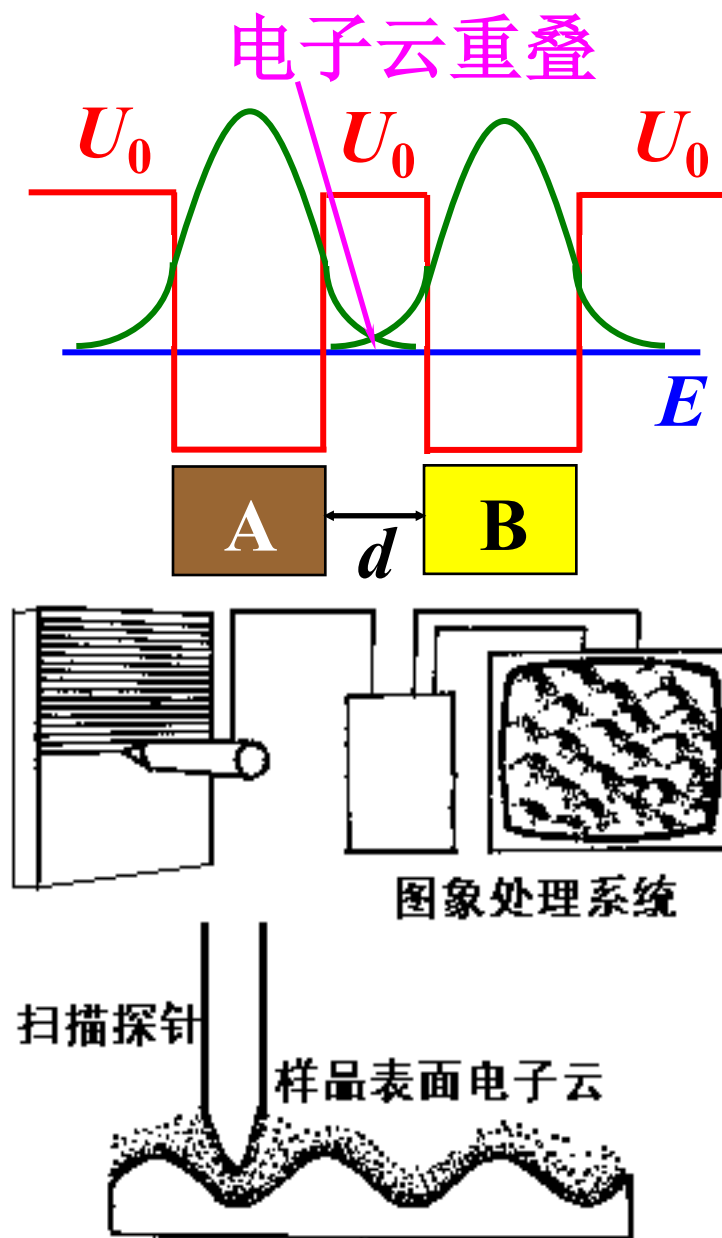


$$i \propto U e^{-A\sqrt{\phi} d}$$

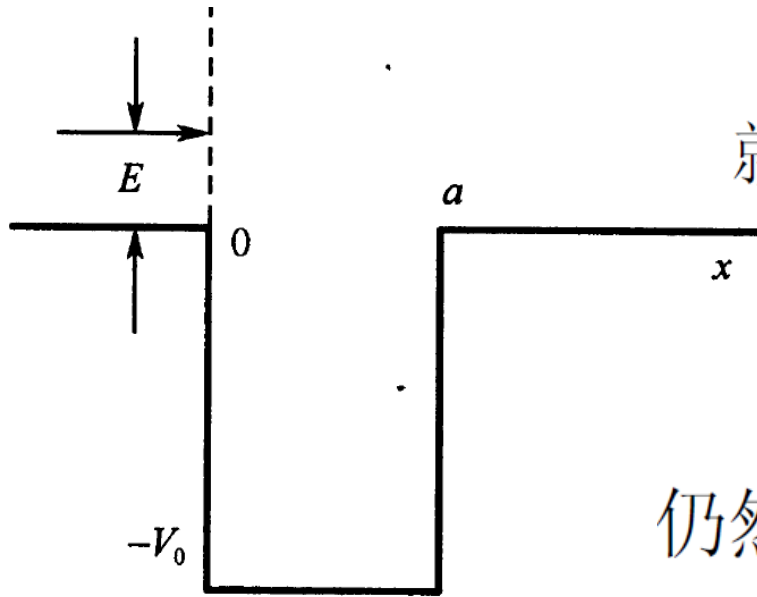
A — 常量

ϕ — 样品表面平均势垒高度 ($\sim \text{eV}$)

$d \sim 1\text{nm}$ (10\AA)



方势阱的共振隧穿



如果把方势垒改成方势阱，
就要把前面的 V_0 变为 $-V_0$ ($V_0 > 0$)
整个实轴都是经典允许区
不存在势垒的隧穿，
仍然发现了波动的特征，即共振现象

对于势阱情况下的透射系数，(练习)

$$T = \frac{4k^2 k'^2}{(k^2 - k'^2)^2 \sin^2 k'a + 4k^2 k'^2},$$

$$k' = \sqrt{2m(E + V_0)} / \hbar$$

当 $k'a = n\pi$ ($n = 1, 2, 3, \dots$)

有 $\sin k'a = 0, \quad T = 1$

共振透射，共振能量的位置：

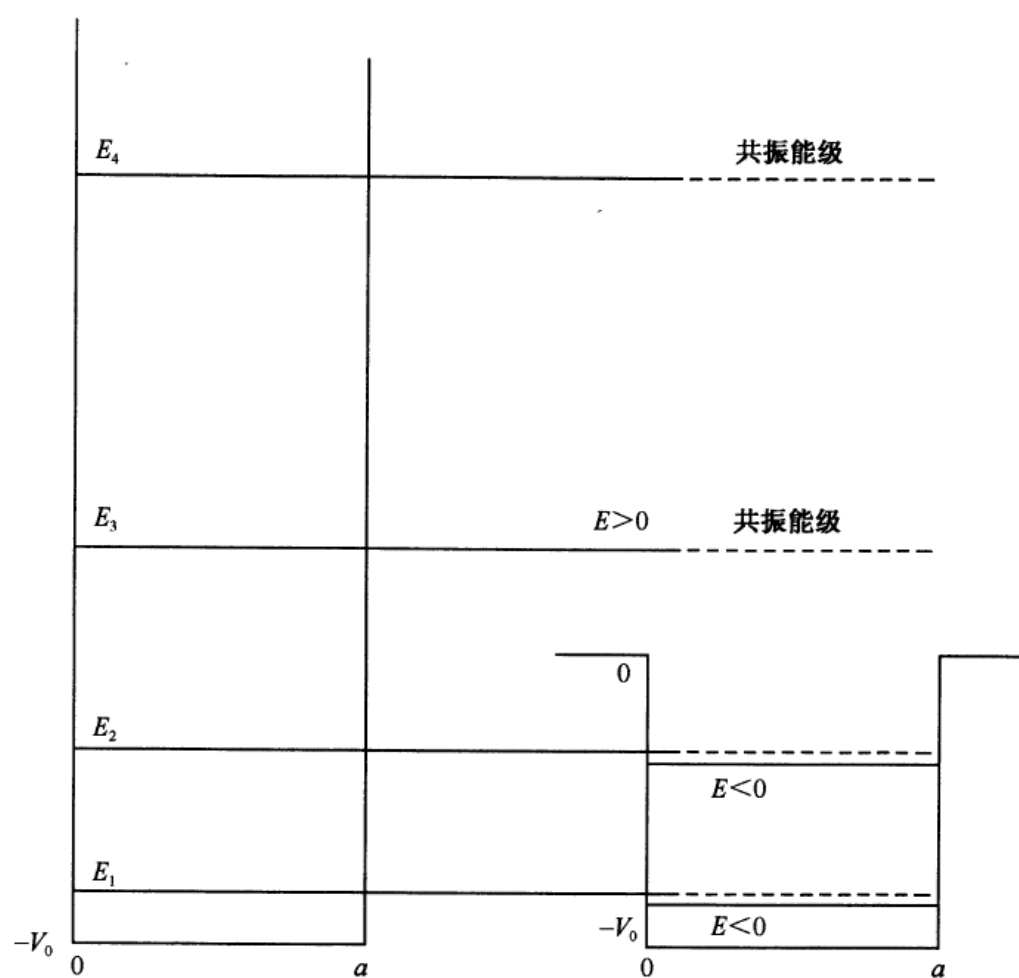
$$E = -V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

以 $-V_0$ 为势能起点宽度为 a 的无限深
势阱中的能级表达式

在这里透射系数出现极大值和
在无限深势阱中形成束缚态的物理原因是相同的

在势阱的两个壁上的反射回波在阱内产生了共振
此时势阱的宽度正好是半波长的整数倍

$$k' = 2\pi / \lambda' \qquad n\lambda' = 2a$$



能量较大时的
共振能级

能量较小时的
束缚态

无限深方势阱中束缚态

$$E_n = -V_0 + n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$$

$$n=1,2,3,\dots$$

有限深方势阱中
束缚态与共振态

当入射粒子的能量恰好与势阱内的
“虚”能级相重合时，就会发生共振透射

三维散射问题初探

关于三维散射问题。在三维情形下，如果

$$U(\vec{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, \quad E > 0,$$

那么粒子就处在非束缚态。仍然可以假设粒子从某个方向以平面波的形式入射（有确定的动量），但是现在散射粒子可能向任何方向出射

问题就是找到粒子向不同的方向散射的几率各有多大，这个几率分布称为散射的角分布。这里需要采用的技术要比一维情形复杂