8.6 量子振子

工作纸

题目

STEP III 1988，第 7 题

继续阅读之前，请先看题目（原题为英文）。题目载于 STEP Support Programme 的试题资料库：

step.maths.org/questions/88-s3-q7

提示

请先自行尝试解题。如果遇到困难，请逐一阅读提示，每读完一个便回到题目再试。标有“停一停”或“试一试”的提示是关键步骤。每个提示之后均留有空位供你演算。

> **想一想**　为甚么像 $e^{-\lambda x^2}$ 这样的函数会是一个合理的猜测？当 $x \to \pm\infty$ 时，$e^{-\lambda x^2}$ 及其导数会怎样？

阶段 1 基态（ground state）

涵盖：$n = 0$ 的情况

想一想 把 $y_0 = e^{-\lambda x^2}$ 求导两次，然后代入 $n = 0$ 时的方程，再约去指数函数（exponential）因子。

停一停，试一试 所得结果必须对每一个 x 都成立，因此可比较 x^2 的系数（coefficient）和常数项。哪一个 λ 能同时满足两者？为甚么 λ 必须是正数？

阶段 2　第一激发态（first excited state）

涵盖：$n = 1$ 的情况

> **想一想**　对 $y_1 = xe^{-\lambda x^2}$ 和 $n = 1$ 重复同样的步骤。同一个 λ 值是否仍然适用？

阶段 3　一个恒等式（identity）

涵盖：该恒等式

> **想一想**　用积法则（product rule）对 $y_m y_n' - y_n y_m'$ 求导，其中有两项会互相抵消。然后利用微分方程（differential equation）代换 y_n'' 和 y_m''。

阶段 4 正交性（orthogonality）

涵盖：正交性

> **停一停，试一试** 把恒等式由 $-\infty$ 积分至 ∞。根据无穷远处的条件，左边等于甚么？为甚么可以除以 $2(m-n)\omega$?

背后的数学

薛定谔方程

1926 年，薛定谔（Erwin Schrödinger）提出，量子粒子可用*波函数*（wave function）$\psi(x)$ 来描述；若粒子的能量为 E，并处于势能 $V(x)$ 之中，则波函数满足

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi.$$

对于弹簧，$V(x) = \frac{1}{2}m\Omega^2 x^2$，把 x 重新标度后，这正是题目中的方程，其中 $E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\Omega$。物理上要求 ψ 在无穷远处衰减至零（这样粒子才确实身处某处），而只有这些能量才能满足这个要求：这就是*量子化*（quantisation），是由数学自然推导出来的结果。留意最低的能量并不是零，而是 $\frac{1}{2}\hbar\Omega$：量子谐振子永远不可能完全静止。这种*零点能*（zero-point energy）真实存在，而且可以量度；正因如此，液态氦在常压下即使到了绝对零度也不会凝固。

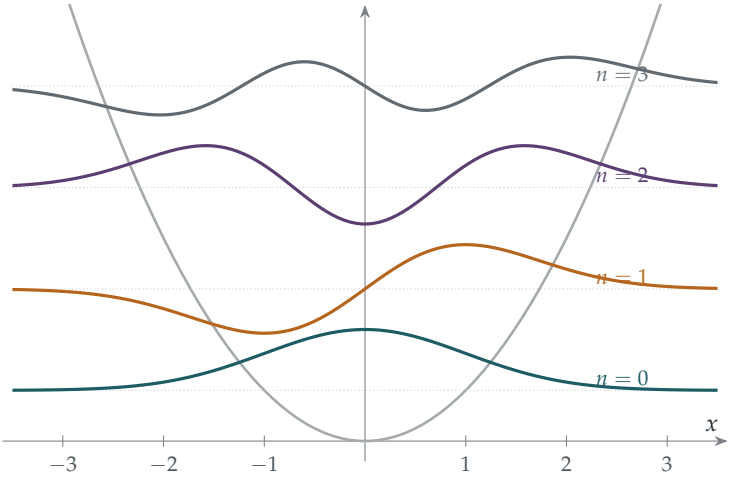

图 8.6.1　量子谐振子（取 $\omega = 1$）。抛物线是势能。每个波函数 y_n 都画在其能级 $n + \frac{1}{2}$ 的高度上；各能级等距排列，而最低的能级高于零。函数 y_n 穿过零 n 次，而且其中任意两个都正交。

埃尔米特函数与施图姆－刘维尔理论

通解为 $y_n = H_n(\sqrt{\omega}x)e^{-\omega x^2/2}$，其中 H_n 是一个 n 次多项式，称为*埃尔米特多项式*（Hermite polynomial）（图 8.6.1）。正交性并非这条方程独有。只要一条方程可以写成 $(py')' + qy = -\lambda wy$ 并配上适当的边界条件，属于不同 λ 值的解便互相正交，所用的论证与第 4 阶段完全相同。这就是*施图姆－刘维尔理论*（Sturm–Liouville theory，1830 年代），它涵盖了傅里叶级数中的正弦函数（Section 3.7）、鼓面的振动、静电学中的勒让德多项式（Legendre polynomials），以及氢原子的波函数。Section 4.7 的特征值问题（eigenvalue problem）是另一个例子：在那里求得的临界值就是特征值 λ，而那些正交函数就是系统固有的“模态”（modes）。

延伸练习

1 **下一个态。**证明 $y_2 = (4\lambda x^2 - 1)e^{-\lambda x^2}$（其中 $\lambda = \frac{\omega}{2}$）满足 $n = 2$ 时的方程。利用 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\omega x^2}\,dx = \sqrt{\pi/\omega}$ 及 $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\omega x^2}\,dx = \frac{1}{2\omega}\sqrt{\pi/\omega}$，直接验证 $\int_{-\infty}^{\infty} y_0 y_2\,dx = 0$。

2 **没有其他能量。**把 n 换成一般的数 ν，并尝试 $y = e^{-\lambda x^2}$。证明只有当 $\nu = 0$ 时它才是解。（事实上，只有当 ν 是非负整数时，才存在衰减的解。）

3 **正弦波。**由 $y'' = -n^2 y$ 及 $y(0) = y(\pi) = 0$ 出发，用同样的方法证明当 $m \neq n$ 时 $\int_0^{\pi} \sin mx \sin nx\,dx = 0$。

4 **阶梯。**证明若 y_n 是方程的解，则 $y_{n+1} = \omega x y_n - y_n'$ 是把 n 换成 $n+1$ 后的方程的解。利用这个结果，由 y_0 生成 y_1 和 y_2。（这就是量子力学中的“升算符”（raising operator）。）

延伸阅读

- **David Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics***（Cambridge University Press）。大学本科物理的标准教科书；第 2 章讨论谐振子。
- **费曼（Richard Feynman）, *QED: The Strange Theory of Light and Matter***（Princeton University Press）。由量子力学的一位大师撰写的科普读物。
- **Mary Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences***（Wiley）。为数学和物理学生讲解埃尔米特多项式和施图姆－刘维尔理论。

完整的引导式解答见第 8.6 节：
https://beyondstep.keithmcnulty.org/zh-hans/ch08/quantum-oscillator.html

每星期一道 STEP 题目，完整讲解：The STEP Up，以电子邮件免费发送，订阅网址：keithmcnulty.substack.com