8.6 量子振子

工作紙

題目

STEP III 1988，第 7 題

繼續閱讀之前，請先看題目（原題為英文）。題目載於 STEP Support Programme 的試題資料庫：

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

提示

請先自行嘗試解題。如果遇到困難，請逐一閱讀提示，每讀完一個便回到題目再試。標有停一停，試一試的提示是關鍵步驟。每個提示之後均留有空位供你演算。

想一想 為甚麼像 $e^{-\lambda x^2}$ 這樣的函數會是一個合理的猜測？當 $x \to \pm\infty$ 時，$e^{-\lambda x^2}$ 及其導數會怎樣？

階段 1 基態（ground state）

涵蓋：$n = 0$ 的情況

想一想 把 $y_0 = e^{-\lambda x^2}$ 求導兩次，然後代入 $n = 0$ 時的方程，再約去指數函數（exponential）因子。

停一停，試一試 所得結果必須對每一個 x 都成立，因此可比較 x^2 的係數（coefficient）和常數項。哪一個 λ 能同時滿足兩者？為甚麼 λ 必須是正數？

階段 2　第一激發態（first excited state）

涵蓋：$n = 1$ 的情況

> **想一想**　對 $y_1 = xe^{-\lambda x^2}$ 和 $n = 1$ 重複同樣的步驟。同一個 λ 值是否仍然適用？

階段 3　一個恆等式（identity）

涵蓋：該恆等式

> **想一想**　用積法則（product rule）對 $y_m y_n' - y_n y_m'$ 求導，其中有兩項會互相抵消。然後利用微分方程（differential equation）代換 y_n'' 和 y_m''。

階段 4 **正交性（orthogonality）**

涵蓋：正交性

> **停一停，試一試** 把恆等式由 $-\infty$ 積分至 ∞。根據無窮遠處的條件，左邊等於甚麼？為甚麼可以除以 $2(m-n)\omega$？

背後的數學

薛定諤方程

1926 年，薛定諤（Erwin Schrödinger）提出，量子粒子可用波函數（wave function）$\psi(x)$ 來描述；若粒子的能量為 E，並處於勢能 $V(x)$ 之中，則波函數滿足

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

對於彈簧，$V(x) = \frac{1}{2}m\Omega^2 x^2$，把 x 重新標度後，這正是題目中的方程，其中 $E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\Omega$。物理上要求 ψ 在無窮遠處衰減至零（這樣粒子才確實身處某處），而只有這些能量才能滿足這個要求：這就是量子化（quantisation），是由數學自然推導出來的結果。留意最低的能量並不是零，而是 $\frac{1}{2}\hbar\Omega$：量子諧振子永遠不可能完全靜止。這種零點能（zero-point energy）真實存在，而且可以量度；正因如此，液態氦在常壓下即使到了絕對零度也不會凝固。

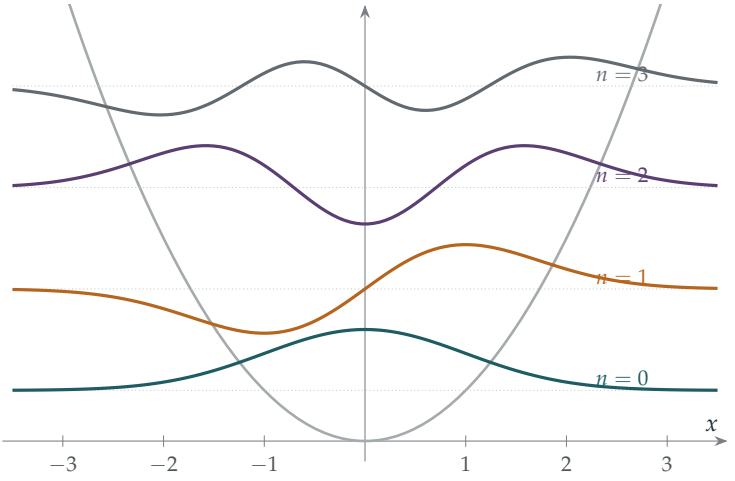

圖 8.6.1　量子諧振子（取 $\omega = 1$）。拋物線是勢能。每個波函數 y_n 都畫在其能級 $n + \frac{1}{2}$ 的高度上；各能級等距排列，而最低的能級高於零。函數 y_n 穿過零 n 次，而且其中任意兩個都正交。

埃爾米特函數與施圖姆－劉維爾理論

通解為 $y_n = H_n(\sqrt{\omega}x)e^{-\omega x^2/2}$，其中 H_n 是一個 n 次多項式，稱為埃爾米特多項式（Hermite polynomial）（圖 8.6.1）。正交性並非這條方程獨有。只要一條方程可以寫成 $(py')' + qy = -\lambda wy$ 並配上適當的邊界條件，屬於不同 λ 值的解便互相正交，所用的論證與第 4 階段完全相同。這就是施圖姆－劉維爾理論（Sturm–Liouville theory，1830 年代），它涵蓋了傅立葉級數中的正弦函數（Section 3.7）、鼓面的振動、靜電學中的勒讓德多項式（Legendre polynomials），以及氫原子的波函數。Section 4.7 的特徵值問題（eigenvalue problem）是另一個例子：在那裏求得的臨界值就是特徵值 λ，而那些正交函數就是系統固有的「模態」（modes）。

延伸練習

1 **下一個態。**證明 $y_2 = (4\lambda x^2 - 1)e^{-\lambda x^2}$（其中 $\lambda = \frac{\omega}{2}$）滿足 $n = 2$ 時的方程。利用 $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\omega x^2}\,dx = \sqrt{\pi/\omega}$ 及 $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\omega x^2}\,dx = \frac{1}{2\omega}\sqrt{\pi/\omega}$，直接驗證 $\int_{-\infty}^{\infty} y_0 y_2\,dx = 0$。

2 **沒有其他能量。**把 n 換成一般的數 ν，並嘗試 $y = e^{-\lambda x^2}$。證明只有當 $\nu = 0$ 時它才是解。（事實上，只有當 ν 是非負整數時，才存在衰減的解。）

3 **正弦波。**由 $y'' = -n^2 y$ 及 $y(0) = y(\pi) = 0$ 出發，用同樣的方法證明當 $m \neq n$ 時 $\int_0^{\pi} \sin mx \sin nx\,dx = 0$。

4 **階梯。**證明若 y_n 是方程的解，則 $y_{n+1} = \omega x y_n - y_n'$ 是把 n 換成 $n+1$ 後的方程的解。利用這個結果，由 y_0 生成 y_1 和 y_2。（這就是量子力學中的「升算符」（raising operator）。）

延伸閱讀

- **David Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics***（Cambridge University Press）。大學本科物理的標準教科書；第 2 章討論諧振子。
- **費曼（Richard Feynman）, *QED: The Strange Theory of Light and Matter***（Princeton University Press）。由量子力學的一位大師撰寫的科普讀物。
- **Mary Boas, *Mathematical Methods in the Physical Sciences***（Wiley）。為數學和物理學生講解埃爾米特多項式和施圖姆－劉維爾理論。

完整的引導式解答見第 8.6 節：
https://beyondstep.keithmcnulty.org/zh-hant/ch08/quantum-oscillator.html

每星期一道 STEP 題目，完整講解：The STEP Up，以電郵免費發送，訂閱網址：keithmcnulty.substack.com