

量子世纪年

一维谐振子薛定谔方程含时演化非级数解析解

王雯宇 程茜 梁淇玮 杨琳朔

(北京工业大学物理与光电工程学院, 北京 100124)

摘要 1926年薛定谔找到了一个一维谐振子薛定谔方程含时演化解析解。这个解并不是能量本征态波函数级数求和形式。这可以让我们从新的角度理解量子系统的随时间演化行为。本文主要对该含时演化解析解进行了分析,给出了两种推导方法,然后继续推广得到了更多的含时演化非级数解析解,找到了这些解析解的递推关系,最后讨论了这些解析解的教学意义及应用。

关键词 薛定谔方程; 谐振子; 含时演化; 解析解

THE ANALYTICAL NON-SERIES TIME EVOLUTION SOLUTION OF ONE DIMENSIONAL OSCILLATOR SCHRÖDINGER EQUATION

WANG Wenyu CHENG Xi LIANG Qiwei YANG Linshuo

(School of Physics and Optoelectronic Engineering, Beijing University of Technology, Beijing 100124)

Abstract In 1926, E. Schrödinger found an analytical solution for the time evolution of the one-dimensional harmonic oscillator Schrödinger Equation. This solution is not in the form of a summation of energy eigenstate wave functions, which provides a new perspective on the time evolution in quantum mechanics. This paper mainly analyzes this analytical time evolution solution and presents two derivation methods. Then the paper further generalizes to obtain more non-series analytical solutions for time evolution oscillator, and finds the recursive relation to obtain these analytical solutions. Finally, the educational significance and applications of these analytical solutions are discussed.

Key words Schrödinger equation; harmonic oscillator; time evolution; analytical solution

一维简谐振动是物理学中简单却极其重要的物理问题之一。这是因为在自然界中广泛存在着简谐振动。任何物体在平衡位置处的小振动,如分子振动、晶格振动等,在适当选择坐标系之后,一般都可以分解为独立的一维简谐振动。简谐振动还往往是复杂运动的初步近似,简谐振动的解也是求解复杂问题的出发点。在量子力学中,由

简谐振子问题求解而产生的算子代数、产生和湮灭算符是量子力学形式体系的基本内容,也是表述量子力学的重要手段,特别在相对论量子场论中,谐振子自由场的产生和湮灭是进一步表达场相互作用的基础。谐振子系统也是物理学理论中少有的能够有严格解析解的物理系统。经典力学的简谐振动方程,量子力学的谐振子波函数,以及

收稿日期: 2024-04-25

通信作者: 王雯宇,北京工业大学物理与光电工程学院教授,wywang@bjut.edu.cn。

引文格式: 王雯宇,程茜,梁淇玮,等. 一维谐振子薛定谔方程含时演化非级数解析解[J]. 物理与工程, 2024, 34(4): 98-109.

Cite this article: WANG W Y, CHENG X, LIANG Q W, et al. The analytical non-series time evolution solution of one dimensional oscillator Schrödinger equation[J]. Physics and Engineering, 2024, 34(4): 98-109. (in Chinese)

路径积分解析形式对理解谐振子及其相关物理机制有着重要意义,因此谐振子问题的探讨是经典力学、量子力学以及量子场论的重要内容。

本文主要计划研究量子力学中谐振子系统的含时演化解析解。读者可能会觉得这是一个非常简单的问题,因为在量子力学中谐振子一维定态本征值和本征态波函数已经非常清楚了。本征态波函数构成正交完备函数基,因此如果没有其他相互作用,束缚在谐振子势中心的粒子初态波函数都可以在正交完备函数基中展开,然后各级波函数乘以其随时演化因子即可得到相应的含时演化波函数。因此,原则上讲,谐振子含时演化的确是一个简单问题。如果初态波函数展开系数可以解析算出,那就得到了含时演化的解析解。

其实,正是因为谐振子问题可以严格求解,所以除了本征态基矢演化之外,谐振子还可以有一些表现非本征态波函数叠加求和的解析解。比如格里菲斯《量子力学》在第二章(习题 2.49)就给出了薛定谔在 1926 年找到的一维谐振子含时解析解形式,如下式^[1]

$$\psi(x, t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}\left(x^2 + \frac{a^2}{2}(1 + e^{-2i\omega t}) + \frac{i\hbar t}{m} - 2ax e^{-i\omega t}\right)\right] \quad (1)$$

公式中的符号约定在下文给出。我们不妨称之为薛定谔谐振子势含时解析解(薛氏谐振子解)。可以看到,初始时刻 $\psi(x, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a)^2\right]$ 并不是本征态波函数,而是谐振子基态波函数平移 a 之后的形式。这个解是非常有意思的,并不是上面所说的规范形式。随之而来的问题是,这个解有什么特殊性质? 还有没有其他类似的解析解? 同时这个解也是非常有用的,它可以作为检验含时薛定谔方程数值求解方法有效性或者确定计算误差的标准函数。

基于以上问题,本文将深入分析薛氏谐振子解形式,并讨论其教学意义及应用。本文作以下安排。第 2 部分讨论薛氏谐振子解式(1)的意义以及推导方法。第 3 部分推广薛氏谐振子解,我们找到了其他形式的含时演化解析解。最后给出本文的结论。

1 薛定谔谐振子势含时解析解

首先,我们给出谐振子薛定谔方程的标准形式^[2]

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi(x, t) \quad (2)$$

其中, m 是谐振子质量, ω 是谐振子固有频率。谐振子薛定谔方程定态解是读者熟知的。其能量本征值是分立的

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

其中, $n=0$ 称为基态。归一化本征波函数是由厄米多项式乘以一个 $\exp(-\alpha^2 x^2/2)$ 因子组成

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \alpha^2 x^2\right) H_n(\alpha x) \quad (4)$$

其中, $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ 。如引言所说,这组波函数构成了正交完备函数基。束缚粒子波函数 $\psi(x, 0)$ 的含时演化由该正交完备基展开。每个函数基乘以相应时间演化因子得到。因此

$$\psi(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \varphi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad c_n = \langle \varphi_n | \psi(x, 0) \rangle \quad (5)$$

除了以上的完备函数基展开方法以外,由路径积分或者传播子理论计算波函数的含时演化也是一种重要手段。谐振子的传播子的解析形式为

$$K(x_b, t_b, x_a, t_a) = \left[\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega(t_b - t_a)}\right]^{1/2} \cdot \exp\left\{\frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega(t_b - t_a)} \cdot [(x_b^2 + x_a^2) \cos \omega(t_b - t_a) - 2x_b x_a]\right\} \quad (6)$$

这个传播子具体求解过程在很多量子力学教材上都有讲解,这里就不说明其推导过程了。它描述的是从点 (x_a, t_a) 到点 (x_b, t_b) 以作用量为相位因子所有路径积分的结果。取 $x_b = x, t_b = t, t_a = 0$,则任意初态粒子波函数 $\psi(x, 0)$ 的含时演化为

$$\psi(x, t) = \int K(x, t, x', 0) \psi(x', 0) dx' \quad (7)$$

由传播子形式还可以确定系统的能量本征值,散射振幅等。有关传播子的其他应用可以参看费曼

的《量子力学和路径积分》^[3]。

有了以上基础之后,我们首先来看薛定谔谐振子势含时解析解的性质。式(1)非常有意思的地方在于 e 指数上还有两个函数演化的因子 $e^{-2i\omega t}$ 和 $e^{-i\omega t}$ 。通常的含时演化波函数很少有这样的形式。由于不是本征态波函数展开形式,也很难看出来对应的能量本征态演化来。我们不妨按照本征态波函数展开初始时刻薛氏谐振子解。具体计算过程比较繁复,但都是量子力学中的基本运算,这里就不展示计算过程了。结果为

$$c_n(0) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} a \right)^n \exp\left(-\frac{m\omega a^2}{4\hbar}\right) \quad (8)$$

每一个本征波函数配上时间演化因子,就可以得到含时演化的本征波函数形式

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(t) \varphi_n(x) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} c_n(0) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \varphi_n(x) \\ &= \exp\left(-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2 - \frac{m\omega a^2}{4\hbar} - \frac{i\omega t}{2}\right) \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \\ &\quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{a}{2}\right)^n e^{-i\omega t} H_n(\alpha x) \end{aligned} \quad (9)$$

读者也可以验证,由本征波函数直接与薛氏谐振子解求内积

$$c_n(t) = \langle \varphi_n | \psi(x, t) \rangle \quad (10)$$

同样可以得到波函数含时演化因子。其形式与初始时刻展开系数乘上时间演化因子的结果是一样的。这当然不是巧合,读者如果熟悉传播子的意义就能明白其中的道理。这个本征函数级数解就是上文说的通常大家能得到的含时演化形式。对比薛氏谐振子解式(1)和本征函数级数解式(9)就会发现,薛氏谐振子解形式简单,容易看出来波函数和粒子概率密度的演化行为,但是不容易看出来谐振子能级、本征波函数的细节。而本征函数级数解能够显示这些细节,但是形式过于复杂。其实利用厄米函数的生成函数可以由本征函数级数解式(9)推导薛氏谐振子解式(1)。下文给出具体过程。也就是说,本征函数级数解可以像很多高等数学中的级数求和解析形式一样,得到一个简单形式的解析解。而从简单的解析形式,能够得到这组级数求和的整体演化行为,因此用这个薛氏谐振子解可以方便地讨论、探究量子力

学里面一些比较复杂的物理性质。下面我们来看这个解的概率密度、坐标、动量等等物理属性。

首先来看薛氏谐振子解的粒子概率密度

$$|\psi(x, t)|^2 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{m\omega}{\hbar}(x - a\cos\omega t)^2\right] \quad (11)$$

可以看到,在任意时刻,粒子都是以高斯分布的形式存在,只是分布的中心位置以 $a\cos\omega t$ 形式振荡,周期为

$$T = \frac{2\pi}{\omega} \quad (12)$$

图1展示了薛氏谐振子解粒子概率密度在一个周期内的振荡的行为。图中实线表示粒子概率密度,虚线为势函数。此时概率密度的振荡行为与经典谐振子振荡行为非常相像,但是需要注意的是二者有着完全不同的物理解释。经典物理中,谐振子振荡是一个实物粒子在平衡位置或者某个物理量在中心值处的振荡。而此时,量子力学中,概率密度指的是在某个位置处单位长度出现粒子的概率。因此原则上讲高斯波包并不是实物粒子本身。另外需要说明的是概率密度的演化公式(11)可以看作是一个的孤子(soliton)形式,即

$$|\psi(x, t)|^2 = \Phi(u), \quad u = x - a\cos\omega t \quad (13)$$

该形式与通常的孤子波函数^[4]

$$\Phi(x, t) = \Phi(u) = \Phi(x - vt) \quad (14)$$

的形式类似。注意,此时的孤子形式并不是非线性方程的产生的孤子解,而是类似孤子形式的概率密度随时演化。通常所说的孤子波指的是波函数具有式(14)的形式,而不是波函数的模方。薛氏谐振子解式(1)自身仅仅是束缚在谐振子势中的波函数,有实部和虚部,不能简单构成孤子式(14)形式。谐振子势薛定谔方程是一个线性方程。在开放的线性波动(行波传播至无穷远)系统中,线性系统孤子解会因为相速度不同而逐渐散开。但是对于束缚态粒子来说,由于波函数全空间积分有限,且被束缚在势函数最低位置附近,类似孤子形式的解是可以长期保持的。从式(11)就可以看出来,波函数在势阱中以高斯波包形式往复振荡。这是薛氏谐振子解特别有意思的地方,因为由本征函数级数解式(9)中第 n 个能级含时演化因子为 $\exp\left[-i\left(n + \frac{1}{2}\right)\omega t\right]$ 得到的振荡周期是

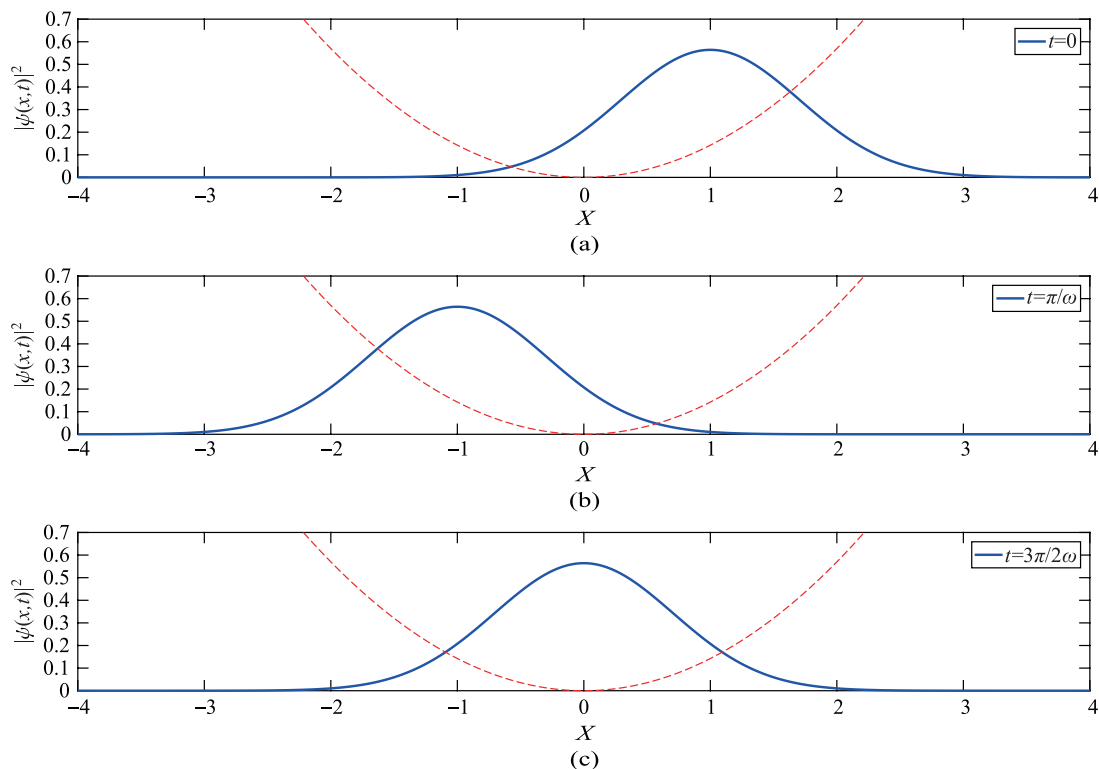


图1 薛定谔谐振子势含时解析解的概率密度(灰色实线)随时间演化图像。灰色虚线为势函数
(a) $t=0$ 时刻概率密度分布; (b) $t=\pi/\omega$ 时刻概率密度分布; (c) $t=3\pi/2\omega$ 时刻概率密度分布

$2\pi/\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$, 不容易看出波函数还可以存在整体的周期。仔细分析才会发现, 不同能级的周期存在一个最小公倍数 $4\pi/\omega$, 这意味着波函数存在一个固定周期为 $4\pi/\omega$ 。自然而然的, 概率密度的周期也就是 $2\pi/\omega$ 。这种性质是由谐振子势能级式(3)决定的。推而广之, 只要能够找到能级倒数的公倍数, 那束缚态粒子都会呈现一个周期运动。比如无限深方势阱中的粒子等。而能级没有公倍数的束缚态粒子, 虽然粒子被束缚在某个势阱中, 但是其随时演化过程中不能回到初始状态, 其概率密度只能看作是混沌状态。当然, 除了周期运动外, 薛氏谐振子解还能保持其概率密度形状不变, 这是孤子的重要属性。含时薛定谔方程波函数是一个在复数域的概率波演化, 概率波函数不具有固定形状, 而概率密度可以保持固定形状。其中原因, 值得深思。

接下来我们来关注薛氏谐振子解的位置和动量的平均值, 简单计算可得

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) x \psi(x, t) dx = a \cos \omega t \quad (15)$$

动量平均值为

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t) dx \\ &= -m a \omega \sin \omega t \end{aligned} \quad (16)$$

位置和动量平均值与经典谐振子位置和动量的关系完全一样。由此读者就可以简单验证艾伦法斯特定理(Ehrenfest's Theorem), 即量子系统平均值演化和经典物理相同。如果单看平均值演化, 坐标和动量之间的关系与经典谐振子完全一模一样。从物理教学的角度看, 谐振子本征态坐标和动量平均值均为零, 也就无从谈论验证艾伦法斯特定理, 因此薛氏谐振子解给出了一个非常好的验证该定理的例子, 特别适合量子力学老师在教学中使用。还可以计算得到系统的平均能量为

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar \omega}{2} + \frac{1}{2} m \omega^2 a^2 \quad (17)$$

这也是非常有意思的点, 也就是说我们把基态波函数平移了距离 a , 系统平均能量增加了。而且增加的和经典力学中振幅为 a 的谐振子总能量是相等的。同时还要注意上式右边第一项是基态能量, 这是经典力学中没有的。

以上讨论了薛氏谐振子解的性质。下面我们尝试来推导这个解。当然这里所谓的推导过程仅

仅是重复薛定谔的结果,至于薛定谔找到该解析解的历史过程,本文不作探讨。上文已经说明薛氏谐振子解在初始时刻是谐振子基态波函数平移 a 之后的结果。因此只需要将平移 a 之后的波函数形式利用传播子将其随时演化的结果计算出来即可。

$$\phi(x, 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a)^2\right] \quad (18)$$

为初态波函数。代入式(7),得到

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega t}\right)^{1/2} \cdot \\ &\exp\left\{\frac{im\omega}{2\hbar\sin\omega t} [(x^2 + x_c^2) \cos\omega t - 2xx_c]\right\} \cdot \\ &\exp\left[-\frac{m\omega}{2\hbar}(x_c - a)^2\right] dx_c \end{aligned} \quad (19)$$

由传播子计算含时演化过程比较复杂,将上式中的括号都展开并整理,可得,

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega t}\right)^{1/2} \cdot \\ &\exp\frac{m\omega}{2\hbar}\left(\frac{i}{\tan\omega t}x^2 - a^2\right) \\ &\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\frac{m\omega}{2\hbar}\left[\left(\frac{i}{\tan\omega t} - 1\right)x_c^2 - \right. \\ &\left.\left(\frac{i}{\sin\omega t}2x - 2a\right)x_c\right] dx_c \end{aligned} \quad (20)$$

这是一个高斯积分。利用公式

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-ax^2 + bx) dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{4a}} \quad (21)$$

积分可得

$$\begin{aligned} \psi(x, t) &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}\left(1 - \frac{i}{\tan\omega t}\right)}} \left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin\omega t}\right)^{1/2} \cdot \\ &\exp\left[\frac{m\omega}{2\hbar}\left(\frac{i}{\tan\omega t}x^2 - a^2\right)\right] \cdot \\ &\exp\left\{\frac{\left[\frac{m\omega}{2\hbar}\left(\frac{i}{\sin\omega t}2x - 2a\right)\right]^2}{4\frac{m\omega}{2\hbar}\left(1 - \frac{i}{\tan\omega t}\right)}\right\} \end{aligned} \quad (22)$$

通过化简整理就可以得到式(1)。

以上推导过程很简单,关键在于我们事先已经知道了谐振子传播子。本文作者在尝试推导薛氏谐振子解的过程中找到了一种利用厄米函数生成函数推导方法。这里可以作为一种求解此问题

的特殊例子展示一下。

我们知道很多特殊函数都有生成函数或者递推公式,比如厄米函数的生成函数具体形式为

$$S(x, r) = \exp(2xr - r^2) = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(x) \frac{r^n}{n!} \quad (23)$$

每一阶的厄米函数都可以通过对 $S(x, r)$ 关于 r 的泰勒级数展开的形式得到,即

$$H_n(x) = \left[\frac{\partial^n}{\partial r^n} S(x, r)\right]_{r=0} \quad (24)$$

$S(x, r)$ 是一个简单函数,对比其余谐振子本征态波函数形式,可以自然联想到生成函数乘以 $\exp(-\alpha^2 x^2/2)$ 因子(泰勒级数中包含了所有本征态波函数);再把 r 看作时间 t 的函数,寻找一个合适的 r 满足薛定谔方程左边对时间 t 导数项的要求就可以凑出来含时薛定谔方程的解。因此我们不妨假定一个谐振子薛定谔方程的含时演化试探解形式为

$$\psi(x, t) = \exp\left(\frac{-\alpha^2 x^2}{2}\right) \exp(2\alpha x r - r^2) g(t) \quad (25)$$

其中, $g(t)$ 和 $r=r(t)$ 都是时间 t 的函数。代入薛定谔方程(2)就可以看出来对 $r(t)$ 和 $g(t)$ 的要求。

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi(x, t) \\ &= \hat{H} \exp(-\alpha^2 x^2/2) \exp(2\alpha x r - r^2) g(t) \end{aligned} \quad (26)$$

其中, $\hat{H}$ 是谐振子哈密顿量算符,坐标表象中

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \quad (27)$$

由于本征态波函数 φ_n 都在 $\exp(-\alpha^2 x^2/2) \cdot \exp(2\alpha x r - r^2) g(t)$ 的泰勒级数中,利用本征波函数性质很容易得到

$$\begin{aligned} \hat{H} \psi(x, t) &= g(t) \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \varphi_n \frac{r^n}{n!} \\ &= g(t) \frac{1}{2} \hbar\omega \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\alpha x) \frac{r^n}{n!} + \\ &g(t) \hbar\omega \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right) \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\alpha x) \frac{n r^n}{n!} \end{aligned} \quad (28)$$

下面是推导过程中的关键一步,上式第二项的级数展开要去凑薛定谔方程左边时间导数项,仔细观察可以看到第二项可以通过求偏导的方法得到

$$r \frac{\partial}{\partial r} [\exp(2\alpha x r - r^2)] = \sum_{n=0}^{\infty} H_n(\alpha x) \frac{n r^n}{n!} \quad (29)$$

因此

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x, t) &= g(t) \hbar\omega \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right) \left(\frac{1}{2} + r \frac{\partial}{\partial r}\right) \cdot \\ &\quad \exp(2\alpha x r - r^2) \\ &= g(t) \hbar\omega \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right) \left(\frac{1}{2} + \frac{i\partial}{\partial \ln r}\right) \cdot \\ &\quad \exp(2\alpha x r - r^2) \end{aligned} \quad (30)$$

对比薛定谔方程左边,就可以猜到此时取 $\ln r = \omega t$, 即 $r = e^{-i\omega t}$ 的形式就可以得到一个对 t 求偏微分的形式

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x, t) &= g(t) \hbar\omega \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right) \left(\frac{1}{2} + \frac{i\partial}{\partial \omega t}\right) \cdot \\ &\quad \exp(2\alpha x e^{-i\omega t} - e^{-2i\omega t}) \end{aligned} \quad (31)$$

因此上式的试探解就剩下 $g(t)$ 形式待定。把试探解代入薛定谔方程左边

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) &= i g(t) \hbar \frac{\partial}{\partial t} \left[\exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right) \cdot \right. \\ &\quad \left. \exp(2\alpha x e^{-i\omega t} - e^{-2i\omega t}) \right] + \\ &\quad i\hbar \left[\frac{d}{dt} g(t) \right] \exp\left(-\frac{\alpha^2 x^2}{2}\right) \cdot \\ &\quad \exp(2\alpha x e^{-i\omega t} - e^{-2i\omega t}) \end{aligned} \quad (32)$$

和式(31)对比,可以看到此时 $g(t)$ 需要满足关系式

$$\frac{1}{2} \hbar \omega g(t) = i\hbar \frac{d}{dt} g(t) \quad (33)$$

因此

$$g(t) = \exp\left(-\frac{i}{2} \omega t\right) = \exp\left(-\frac{i E_0 t}{\hbar}\right) \quad (34)$$

代入试探解最终也可以得到薛氏谐振子解。以上的推导过程连蒙带猜,的确不是一个标准的求解薛定谔含时解的方法,但至少能够为读者提供了一种试探求解的思路,仅供参考。

薛定谔谐振子势含时解析解的属性及其推导过程展示了谐振子系统一些非常奇妙的点。接下来的问题就是这个薛氏谐振子解是否可以继续推广下去? 得到更多的非本征函数展开的含时解析

解形式? 为此,本文作者做了多方尝试,得到了一些其他的含时解析解,在下一节进行详细说明。

2 谐振子含时演化非级数解析解

由上一节的讨论可以知道,要得到非级数形式的含时解析解,只要初态波函数和传播子的积分可以解析算出即可。但是这并不是一个简单的事情,读者查阅数学物理方法的相关文献会发现和传播子形式接近的解析积分其实并不多。受上文的推导薛氏谐振子解过程的启发,我们得到了更多有趣的含时演化非级数解析解。

根据谐振子传播子积分公式(7)就可以看出来,传播子自身满足含时薛定谔方程是整个问题的关键点,因为初态在某个位置 a 处的粒子(波函数 $\delta(x-a)$)的演化其实就是传播子自身。

$$\begin{aligned} \phi(x, t; a) &= \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t} \right)^{1/2} \cdot \\ &\quad \exp\left\{ \frac{i m \omega}{2 \hbar \sin \omega t} [(x^2 + a^2) \cos \omega t - 2ax] \right\} \end{aligned} \quad (35)$$

和自由粒子的传播子一样,很容易验证上式在 t 趋于零的时候是一个 δ 函数。同时读者也可以验证,这个粒子演化满足含时薛定谔方程。对式(35)求模方,就得到了粒子概率密度演化方程。

$$|\phi(x, t; a)|^2 = \frac{m\omega}{2\pi \hbar \sin \omega t} \quad (36)$$

虽然从解析上看,式(35)后面的 e 指数演化项的模方为 1,似乎粒子在全空间分布的概率密度是均匀的。但是实际上,由于初始时刻是 δ 函数,所以粒子概率密度并不能看作是均匀分布于全空间,否则就与谐振子势相矛盾。谐振子势在坐标趋向于无穷大的时候势函数无穷大,此时合理存在的只能是束缚态粒子。因此广义函数 δ 函数表达的局域在某个点的粒子在束缚态问题中,并不是一个恰当的函数表达。这里就不做深入讨论了。

在 δ 函数之外,我们自然可以想到的是谐振子其他本征态同样平移 a 之后的含时演化。初始时刻谐振子本征波函数平移 a 之后的形式为

$$\begin{aligned} \psi_n(x_c, 0) &= \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{1/2} \exp\left[-\frac{1}{2} \alpha^2 (x_c - a)^2\right] \cdot \\ &\quad H_n(\alpha(x_c - a)) \end{aligned} \quad (37)$$

厄米多项式的形式为^[5]

$$H_n(x) = (2x)^n - \frac{n(n-1)}{1!}(2x)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!}(2x)^{n-4} - \dots + (-1)^{\left[\frac{n}{2}\right]} \frac{n!}{\left[\frac{n}{2}\right]!} (2x)^{n-2\left[\frac{n}{2}\right]} \quad (38)$$

这是一个幂级数展开的形式。幂级数和传播子(6)中的 e 指数积分就是通常的 Γ 函数,因此都是可以得到解析解的。首先我们来考虑谐振子第一激发态本征波函数平移 a 后的波函数的演化。初态波函数为

$$\begin{aligned} \psi_1(x_c, 0) \\ = \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \right)^{\frac{1}{2}} 2a(x_c - a) \exp \left[-\frac{1}{2} a^2 (x_c - a)^2 \right] \end{aligned} \quad (39)$$

和传播子积分就可以得到含时演化

$$\begin{aligned} \psi_1(x, t) \\ = 2 \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin\omega t} \right)^{1/2} \cdot \\ \exp \left\{ \frac{i m \omega}{2 \hbar \sin\omega t} [(x^2 + x_c^2) \cos\omega t - 2x x_c] \right\} \cdot \\ \exp \left[-\frac{1}{2} a^2 (x_c - a)^2 \right] \alpha(x_c - a) dx_c \end{aligned} \quad (40)$$

这个积分和上一节平移基态波函数的含时演化更加复杂,因此我们这里展示其计算细节。令

$$\alpha(x_c - a) = \zeta \quad (41)$$

式(40)简化为

$$\begin{aligned} \psi_1(x, t) \\ = 2 \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{2\pi i \sin\omega t} \right)^{1/2} \cdot \\ \exp \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan\omega t} - 1 \right) \cdot \right. \\ \left[\zeta^2 + 2 \frac{a i a \cos\omega t - i a x}{i \cos\omega t - \sin\omega t} \zeta + \left(\frac{a i a \cos\omega t - i a x}{i \cos\omega t - \sin\omega t} \right)^2 - \right. \\ \left. \left(\frac{a i a \cos\omega t - i a x}{i \cos\omega t - \sin\omega t} \right)^2 + \right. \\ \left. \left. \frac{i a^2 \cos\omega t x^2 - 2 a x i a^2 + i a^2 \cos\omega t a^2}{i \cos\omega t - \sin\omega t} \right] \right\} \zeta d\zeta \end{aligned} \quad (42)$$

尽量简化那些不参与积分的项,再令

$$b = - \left(\frac{a i a \cos\omega t - i a x}{i \cos\omega t - \sin\omega t} \right)^2 + \frac{i a^2 \cos\omega t x^2 - 2 a x i a^2 + i a^2 \cos\omega t a^2}{i \cos\omega t - \sin\omega t} \quad (43)$$

积分形式变为

$$\begin{aligned} \psi_1(x, t) \\ = 2 \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{1}{2\pi i \sin\omega t} \right)^{1/2} \cdot \\ \exp \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan\omega t} - 1 \right) \cdot \right. \\ \left[\left(\zeta + \frac{a i a \cos\omega t - i a x}{i \cos\omega t - \sin\omega t} \right)^2 + b \right] \right\} \cdot \\ \left(\zeta + \frac{a i a \cos\omega t - i a x}{i \cos\omega t - \sin\omega t} - \frac{a i a \cos\omega t - i a x}{i \cos\omega t - \sin\omega t} \right) d\zeta \end{aligned} \quad (44)$$

这是一个复变函数积分。可以看到该积分在复平面上解析。因此实数 x_a 轴上的积分可以平移到另外一个实数轴 z 上的积分

$$z = \zeta + \frac{a i a \cos\omega t - i a x}{i \cos\omega t - \sin\omega t} \quad (45)$$

经过化简,式(40)形式变为

$$\begin{aligned} \psi_1(x, t) \\ = 2 \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{1}{2\pi i \sin\omega t} \right)^{1/2} \cdot \\ \exp \left[\frac{b}{2} \left(\frac{i}{\tan\omega t} - 1 \right) \right] \cdot \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan\omega t} - 1 \right) z^2 \right] z dz - \\ 2 \left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{a i a \cos\omega t - i a x}{i \cos\omega t - \sin\omega t} \left(\frac{1}{2\pi i \sin\omega t} \right)^{1/2} \cdot \\ \exp \left[\frac{b}{2} \left(\frac{i}{\tan\omega t} - 1 \right) \right] \cdot \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan\omega t} - 1 \right) z^2 \right] dz \end{aligned} \quad (46)$$

很明显,第一行积分中的被积函数是个奇函数,积分为0。再利用高斯积分可以直接将上式积出。将 b 代入并化简,最终我们可以得到谐振子第一激发态平移 a 之后的含时演化形式

$$\begin{aligned} \psi_1(x, t) \\ = \sqrt{\frac{2a^3}{\sqrt{\pi}}} e^{-i\frac{3\omega t}{2}} (x - a \cos\omega t) \cdot \\ \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} \left[x^2 + \frac{a^2}{2} (1 + e^{-2i\omega t}) - 2ax e^{-i\omega t} \right] \right\} \end{aligned} \quad (47)$$

这里我们就得到了一个和薛氏谐振子解式(1)类似的非级数含时演化解析解。与式(1)相比可知,式(1)的演化因子 $e^{-i\omega t}$ (e 指数中的 $i\hbar t/m$ 项)换成了 $e^{-i3\omega t/2}$ (第一激发态振荡频率);后面多了一个 $x - a \cos \omega t$ 项, e 指数含时演化因子不变。所以波函数形式与第一激发态波函数形式也非常相像。容易看到,此时粒子概率密度演化的周期仍为 $2\pi/\omega$, 平均能量为

$$\langle E \rangle = \frac{3}{2} \hbar \omega + \frac{1}{2} m \omega^2 a^2 \quad (48)$$

物理图像上也和基态波函数平移类似,多出来了与经典力学对应的谐振子能量项。

往下可以继续用更高级激发态平移来推广谐振子含时解析解,但是每一级都专门做一次积分显然是太复杂了。像通常量子力学求解问题的方法一样,读者自然可以想到,最好能够找到一个递推关系,那其他的解自然就可以顺序写出来了。这里当然是用厄米多项式的递推关系^[5]

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0 \quad (49)$$

把上式中的 x 替换为 $x_c - a$, 然后两边分别乘以 $\exp[-\alpha^2(x_c - a)/2]$ 因子和归一化常数,就得到了各级本征态波函数。然后把上式两边乘以传播子进行积分,就可以得到含时演化波函数的递推关系。利用上文约定的坐标变换,最终得到的 $\psi_{n+1}(x, t)$ 形式为

$$\begin{aligned} \psi_{n+1}(x, t) &= \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^{n+1} (n+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t} \right)^{1/2} \cdot \\ &\exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan \omega t} - 1 \right) (z^2 + b) \right] \cdot \\ &2 \left(z - \frac{a i \alpha \cos \omega t - i \alpha x}{i \cos \omega t - \sin \omega t} \right) \cdot \\ &H_n \left(z - \frac{a i \alpha \cos \omega t - i \alpha x}{i \cos \omega t - \sin \omega t} \right) dz - \\ &2n \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^{n+1} (n+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t} \right)^{1/2} \cdot \\ &\exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan \omega t} - 1 \right) (z^2 + b) \right] \cdot \\ &H_{n-1} \left(z - \frac{a i \alpha \cos \omega t - i \alpha x}{i \cos \omega t - \sin \omega t} \right) dz \end{aligned} \quad (50)$$

其中,右边第一个积分需要利用到分部积分法将积分中的含 z 的项去掉,

$$\begin{aligned} \psi_{n+1}(x, t) &= \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^{n+1} (n+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \\ &\left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t} \right)^{1/2} \frac{1}{\frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan \omega t} - 1 \right)} \cdot \\ &\left\{ \exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan \omega t} - 1 \right) (z^2 + b) \right] \cdot \right. \\ &H_n \left(z - \frac{a i \alpha \cos \omega t - i \alpha x}{i \cos \omega t - \sin \omega t} \right) \Big\}_{-\infty}^{+\infty} - \\ &\left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^{n+1} (n+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \\ &\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t} \right)^{1/2} \frac{1}{\frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan \omega t} - 1 \right)} \cdot \\ &\exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan \omega t} - 1 \right) (z^2 + b) \right] \cdot \\ &H'_n \left(z - \frac{a i \alpha \cos \omega t - i \alpha x}{i \cos \omega t - \sin \omega t} \right) dz - \\ &2 \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^{n+1} (n+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{a i \alpha \cos \omega t - i \alpha x}{i \cos \omega t - \sin \omega t} \cdot \\ &\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t} \right)^{1/2} \cdot \\ &\exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan \omega t} - 1 \right) (z^2 + b) \right] \cdot \\ &H_n \left(z - \frac{a i \alpha \cos \omega t - i \alpha x}{i \cos \omega t - \sin \omega t} \right) dz - \\ &2n \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^{n+1} (n+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega t} \right)^{1/2} \cdot \\ &\exp \left[\frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan \omega t} - 1 \right) (z^2 + b) \right] \cdot \\ &H_{n-1} \left(z - \frac{a i \alpha \cos \omega t - i \alpha x}{i \cos \omega t - \sin \omega t} \right) dz \end{aligned} \quad (51)$$

上式右边第一项显然为零。分部积分出现的厄米函数的导数项可以利用厄米多项式另外一个递推关系^[5]

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x) \quad (52)$$

这样就可以将上式的后三项积分出来了

$$\begin{aligned} \psi_{n+1}(x, t) &= -2 \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^{n+1} (n+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\sqrt{\pi} 2^n n!}{\alpha} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \\ &\frac{a i \alpha \cos \omega t - i \alpha x}{i \cos \omega t - \sin \omega t} \psi_n(x, t) - \end{aligned}$$

$$2n \left[\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^{n+1} (n+1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\sqrt{\pi} 2^{n-1} (n-1)!}{\alpha} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\tan \omega t} - 1 \right) \right] \psi_{n-1}(x, t) \quad (53)$$

再代入 ψ_n, ψ_{n-1} 的归一化因子, 就可以得到谐振子含时演化非级数解的递推关系

$$\psi_{n+1}(x, t) = \sqrt{\frac{2}{n+1}} e^{-i\omega t} \alpha (x - a \cos \omega t) \psi_n(x, t) - \sqrt{\frac{n}{n+1}} e^{-2i\omega t} \psi_{n-1}(x, t) \quad (54)$$

由于我们已经知道了 $\psi_0(x, t)$ (第2节中的 $\psi(x, t)$) 和 $\psi_1(x, t)$ 的形式, 因此原则上我们找到了求出这种平移本征波函数的所有含时演化解析解的方法。比如

$$\begin{aligned} \psi_2(x, t) &= \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{5i\omega t}{2}} [2\alpha^2 (x - a \cos \omega t)^2 - 1] \cdot \\ &\exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} \left[x^2 + \frac{a^2}{2} (1 + e^{-2i\omega t}) - 2ax e^{-i\omega t} \right] \right\} \end{aligned} \quad (55)$$

读者可以用第二激发态波函数平移 a 与传播子积分来验证一下, 同样可以得到式(55)。

图2展示了 $\psi_2(x, t)$ 的概率密度随时演化图像。可以看到, 上式的位置概率密度和一维谐振子第二激发态的位置概率密度形状保持一致, 随着时间的变化而左右振荡。具体计算可得

$$\begin{aligned} |\psi_2(x, t)|^2 &= \left(\frac{\alpha}{2\sqrt{\pi}} \right)^2 [2\alpha^2 (x - a \cos \omega t)^2 - 1]^2 \cdot \\ &\exp [-\alpha^2 (x - a \cos \omega t)^2] \end{aligned} \quad (56)$$

显然这也是孤子解形式。分析递推公式(56)可以看出, 为什么每一个解都会还有一个 $\exp\{-m\omega/2\hbar[\dots]\}$, 同时也会看出来为什么求解出来的含时演化是一个孤子解形式。递推公式中 $x - a \cos \omega t$ 作为整体出现的; 而

$$\begin{aligned} &\left| \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} \left[x^2 + \frac{a^2}{2} (1 + e^{-2i\omega t}) - 2ax e^{-i\omega t} \right] \right\} \right|^2 \\ &= \exp [-\alpha^2 (x - a \cos \omega t)^2] \end{aligned} \quad (57)$$

$x - a \cos \omega t$ 也是作为一个整体出现的。这个 $x - a \cos \omega t$ 和 e 指数项保持了概率密度分布的整体本征态波函数形状。从 $\psi_1(x, t)$ 和 $\psi_2(x, t)$ 形式还

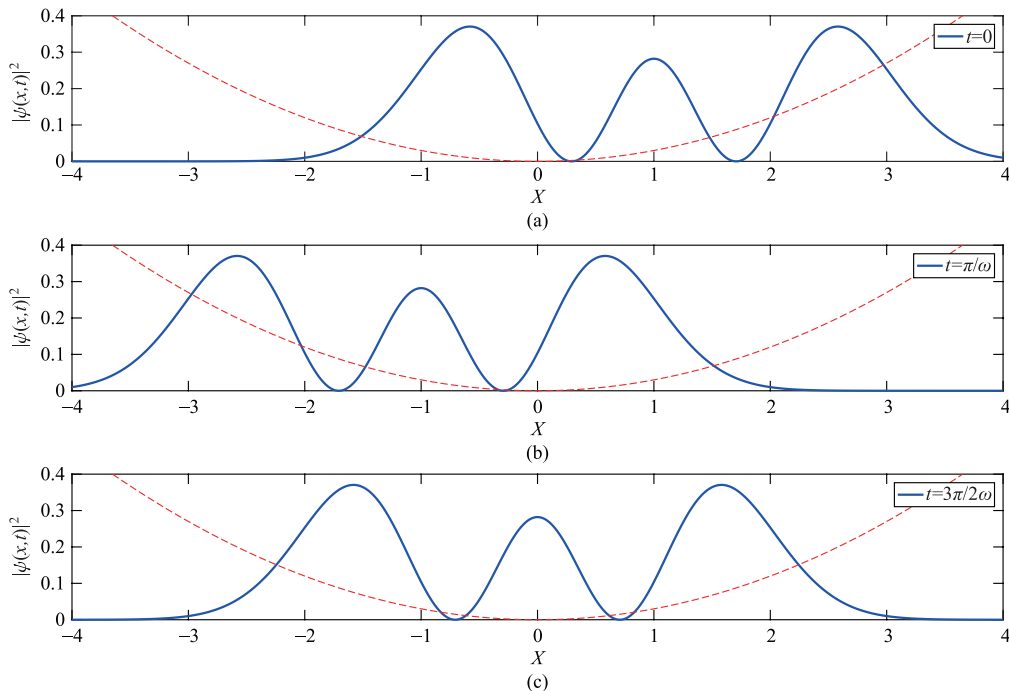


图2 初态波函数为 $\psi_2(x, 0) = 2 \left(\frac{\alpha}{8\sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ \frac{\alpha^2}{2} [-(x-a)^2] \right\} [2(x-a)^2 - 1]$ 的一维谐振子概率密度 (灰色实线) 随时间演化图像。灰色虚线为势函数

(a) $t=0$ 时刻概率密度分布; (b) $t=\pi/\omega$ 时刻概率密度分布; (c) $t=3\pi/2\omega$ 时刻概率密度分布

可以看出来,此类含时演化解析解前面还有一个含时演化因子 $\exp(-iE_n t/\hbar)$ 。这个因子使得波函数振荡很快,但是对粒子概率密度的振荡不会产生影响。很明显,所有这些我们找到的谐振子含时演化非级数解析解初始时刻是正交的。演化过程中,振荡速度不同,但是经过一个公倍数周期之后,又回到了初始时刻。当然,由于薛定谔方程是线性方程,这些解的线性组合也是含时薛定谔方程的解。总之,本文得到了此类谐振子解析解形式都很有意思,虽然不是本征态,但是似乎又具有本征态的某些特征。这值得我们深入探究,比如此时怎么用厄米函数生成函数求解等等。如果在量子力学的课堂上让学生去尝试,将是非常有趣且有训练效果的教学内容。

以上和传播子积分的初态都是谐振子本征态波函数平移之后的形式。读者会发现,和传播子积分可以解析计算的原因在于初态波函数中的 e 指数项和传播子中的 e 指数项可以凑成二次型,利用式(21)就可以解析计算。这并没有要求初态波函数一定是本征态波函数平移的形式。于是,下一步的推广,自然是取一个任意的二次型 e 指数项初态波函数和传播子积分即可。在不失一般性的情况下,可以把上文的初态波函数(37)稍作扩充

$$\phi_n(x_c, 0) = \left(\frac{\beta}{\sqrt{\pi} 2^n n!} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \beta^2 (x_c - a)^2 \right] \cdot H_n(\beta(x_c - a)) \quad (58)$$

即把式(37)中的 α 替换为 β 。 β 是和 α 同量纲的一个任意参数,并不一定等于 $\sqrt{m\omega/\hbar}$ 。这样做实际上就把初态波函数推广到了无穷多个含有二次型 e 指数项的形式。接下来就可以和传播子积分得到谐振子含时演化非级数解析解了。具体求解过程和上面推导差不多是一样的,只是更复杂一些。本文这里直接给出计算结果来。 $\phi_0(x, 0)$ 的演化为

$$\begin{aligned} \phi_0(x, t) = & \sqrt{\frac{\alpha^2}{\alpha^2 \cos \omega t + \beta^2 \sin \omega t}} \frac{\beta}{\sqrt{\pi}} \cdot \\ & \exp \left\{ \frac{-1}{2(\alpha^2 \cos \omega t + \beta^2 \sin \omega t)} \cdot \right. \\ & \left. [\alpha^2 (\beta^2 \cos \omega t + \alpha^2 \sin \omega t) x^2 - \right. \\ & \left. 2a\alpha^2 \beta^2 x + \alpha^2 \beta^2 a^2 \cos \omega t] \right\} \quad (59) \end{aligned}$$

$\phi_1(x, 0)$ 的演化为

$$\begin{aligned} \phi_1(x, t) = & \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{\frac{-3i\omega t}{2}} (x\beta - a\beta \cos \omega t) \cdot \\ & \exp \left\{ \frac{1}{2} \left(\frac{\beta^2 \sin \omega t - i\alpha^2 \beta^2 \cos \omega t}{\beta^2 \sin \omega t} \right) \cdot \right. \\ & \left. \left[\frac{(a\alpha^2 \beta \cos \omega t - x\alpha^2 \beta)^2}{\alpha^2 \cos \omega t + i\beta^2 \sin \omega t} - \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{\alpha^2 \beta^2 \cos \omega t x^2 - 2a\alpha^2 \beta^2 x + \alpha^2 \beta^2 \cos \omega t a^2}{\alpha^2 \cos \omega t + i\beta^2 \sin \omega t} \right] \right\} \quad (60) \end{aligned}$$

与上文推导类似,利用厄米函数递推公式,同样可以得到此时的含时演化非级数解析解递推公式

$$\begin{aligned} \phi_{n+1}(x, t) = & \sqrt{\frac{2}{n+1}} \frac{x\alpha^2 \beta - a\alpha^2 \beta \cos \omega t}{\alpha^2 \cos \omega t + i\beta^2 \sin \omega t} \phi_n(x, t) - \\ & \sqrt{\frac{n}{n+1}} \left(\frac{\alpha^2 \cos \omega t - i\beta^2 \sin \omega t}{\alpha^2 \cos \omega t + i\beta^2 \sin \omega t} \right) \phi_{n-1}(x, t) \quad (61) \end{aligned}$$

读者可以验证,当 $\beta = \alpha$ 的时候,以上结果就回到上文相应的公式,同时这些结果也都满足含时谐振子薛定谔方程。这里我们就得到了更多谐振子含时演化非级数解析解。同样由于本征态演化有公倍数周期,概率密度演化仍然存在周期 $2\pi/\omega$ 。但是此时的概率密度演化就不像上面本征态波函数平移之后的孤子形式。图3展示了 $|\phi_1(x, t)|^2$ 的含时演化。可以看到,虽然被束缚在势阱中,概率密度演化过程中并不保持稳定形状,而是时而“变胖”,时而“变瘦”。具体来说就是,当 β 小于 α 的时候,初始波函数比对应的本征态波函数“胖”;演化到中间位置时,就变“瘦”了。相反情况,如果初始“瘦”,到中间就变“胖”。这种形状的振荡行为看上去是非常有意思的。至于此时坐标、动量平均值以及能量等等情况,限于篇幅,就不做深入讨论了。

本文一直在关注一维谐振子薛定谔方程的含时演化非级数解析解,最后稍微解释一下以上计算的算符系统表达形式。熟悉量子力学算符表示的读者就会知道波函数平移 a 的形式在坐标表象中可以通过动量算符 $\hat{P}$ 来实现,即

$$\begin{aligned} \phi(x - a) = & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi^{(n)}(x)}{n!} (-a)^n \\ = & \exp \left(-i \frac{a\hat{P}}{\hbar} \right) \phi(x) \quad (62) \end{aligned}$$

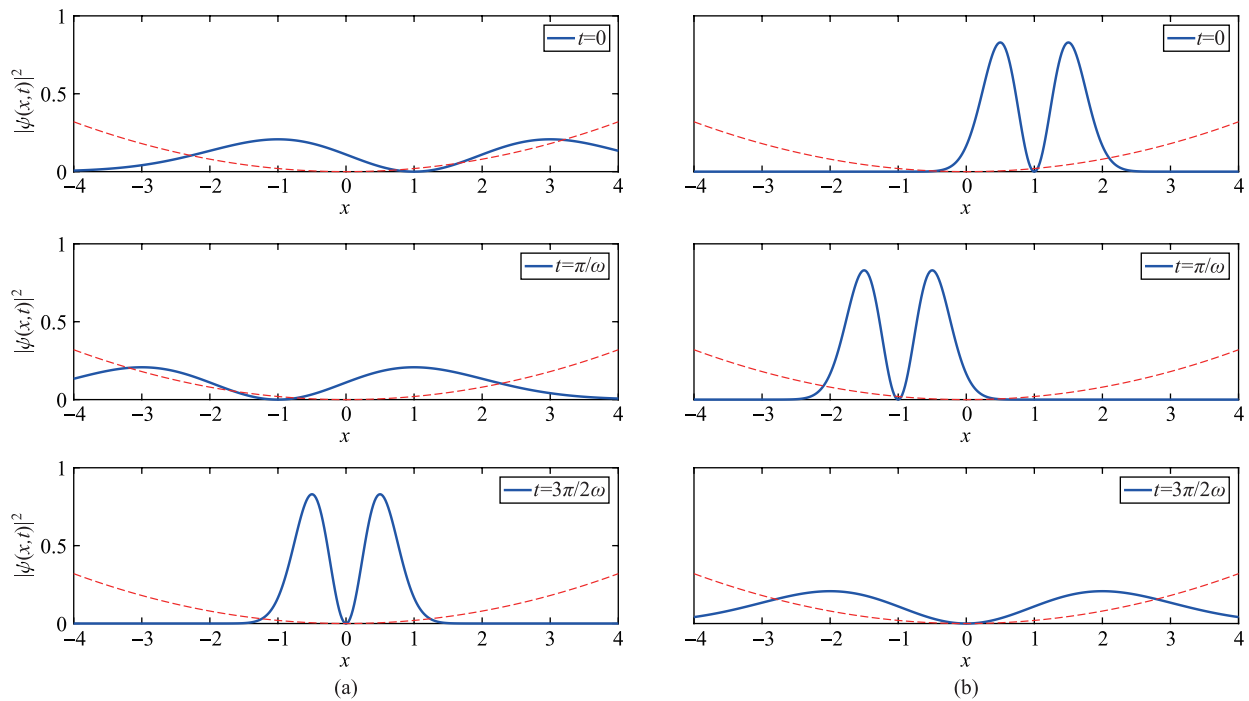


图 3

(a) $\beta = \frac{1}{2}\alpha$ 的一维谐振子概率密度(实线)随时间演化图像,虚线为势函数; (b) $\beta = 2\alpha$ 的一维谐振子概率密度(实线)随时间演化图像。虚线为势函数

其中, $\psi^{(n)}(x) = d^n \psi / dx^n$ 是波函数在 x 点出的 n 阶导数。由此可知利用算符系统表达平移之后的波函数为

$$|\psi(x-a)\rangle = e^{-\frac{ia\hat{p}}{\hbar}} |\psi(x)\rangle \quad (63)$$

计算 x, p 以及能量 E 的平均值可以由以上算符系统表达清晰地计算出来。比如平均能量

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle \varphi_n(x-a) | \hat{H} | \varphi_n(x-a) \rangle \\ &= \langle \varphi_n(x) | e^{\frac{ia\hat{p}}{\hbar}} \hat{H} e^{-\frac{ia\hat{p}}{\hbar}} | \varphi_n(x) \rangle \end{aligned} \quad (64)$$

利用豪斯朵夫(Hausdorff)公式

$$e^A \hat{B} e^{-A} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [\hat{A}, \hat{B}]_{(n)} \quad (65)$$

其中

$$[\hat{A}, \hat{B}]_{(0)} = \hat{B}, \quad [\hat{A}, \hat{B}]_{(n)} = [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]_{(n-1)}] \quad (66)$$

因此平均能量的结果为

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle \varphi_n(x) | \hat{H} | \varphi_n(x) \rangle + \\ &\quad m\omega^2 a \langle \varphi_n(x) | \hat{x} | \varphi_n(x) \rangle + \\ &\quad \frac{1}{2} m\omega^2 a^2 \langle \varphi_n(x) | \varphi_n(x) \rangle \\ &= E_n + \frac{1}{2} m\omega^2 a^2 \end{aligned} \quad (67)$$

这就解释了为什么本征函数平移 a 之后多出来了经典谐振子能量项。其他平均位置和动量等,都可以类似求解出来。这种算符求解方法其实对应了量子力学的矩阵力学形式。读者也可以对比体会量子力学波动力学与矩阵力学的差别。

3 结语

本文主要讨论了薛定谔在 1926 年找到的一维谐振子薛定谔方程含时演化解析解。这个解并不是能量本征态波函数级数求和形式。我们知道,物理学中只有极少的系统有严格的解析解,这种含时演化非级数解析解对我们理解量子系统时间演化提供了新的视角。谐振子势束缚态的演化可以组成孤立子的形式,这是非常有趣的现象。本文主要对该含时演化解析解进行了分析,给出了两种推导方法。传播子积分的方法是求含时演化解析解的标准方法。正是因为谐振子传播子可以解析计算出来,给了我们得到其他类似含时演化解析解的可能。后面我们继续推广得到了更多的含时演化非级数解析解,同时利用厄米函数的递推关系找到了这些解析解的递推关系。

最后简单讨论一下这些含时演化非级数解析解的意义。首先在量子力学的课堂上,这些解析解的推导过程是对学生非常好的训练。当然,计算过程非常复杂,且需要在学生掌握路径积分或者传播子理论之后才能完成。正如上文所说,这些解析解保持了本征态波函数概率密度的波形,维持着孤立子振荡行为。这开拓了我们对束缚态粒子含时演化的物理图像。另外一点也需要再强调一下,这些解其实可以作为求解量子力学问题数值计算的验证函数。我们知道,物理学中含时演化非级数解析解是非常少的,所以用这些解析解可以验证数值求解含时薛定谔方程方法的有效性。薛定谔方程的数值求解通常会采用有限元方法,把时空离散化,逐步求解。仅仅凭借数值方法理论给出计算误差分析并不一定是合适的。而如果有一个严格的含时演化解析解,相应的计算误差就完全可以准确确定。这在前沿物理研究中不失为一种好的演算工具。总之,论文作者认为最

重要的点在于这些含时演化非级数解析解形式非常简单!漂亮!值得学习量子力学的老师和同学们分析并欣赏。

参 考 文 献

- [1] GRIFFITHS D J, SCHROETER D F. Introduction to quantum mechanics[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2018.
- [2] 曾谨言. 量子力学[M]. 5 版. 北京: 科学出版社, 2013.
- [3] FEYNMAN R P, HIBBS A R, STYER D F. Quantum mechanics and path integrals[M]. North Chelmsford, MA: Courier Corporation, 2010.
- [4] Manukure, Solomon, and Timesha Booker. A short overview of solitons and applications[J]. Partial Differential Equations in Applied Mathematics, 2021(4): 100140.
- [5] 四川大学数学学院高等数学教研室, 四川大学数学学院微分方程教研室. 高等数学(物理类专业用)第四册[M]. 北京: 高等教育出版社, 2020.

