Л Е К Ц И Я   8

ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Классический осциллятор.

Пусть частица совершает одномерное движение. Разложим ее потенциальную энергию в ряд Тейлора в окрестности $x = 0$ до второго порядка:

$$V(x) = V(0) + \frac{\partial V}{\partial x}\Big|_{x=0}\cdot x + 1/2\ \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}\Big|\cdot x^2.$$

Пусть x=0 - положение устойчивого равновесия. Тогда в этой точке $V(x)$ - минимум, а потому

$$\frac{\partial V}{\partial x}(0) = 0, \quad \frac{\partial^2 V}{\partial x^2}(0) \equiv k>0.$$

Гамильтониан записывается как

$$H = p^2/2\mu + kx^2/2.$$

Он приводит к уравнению движения

$$\mu\ddot{x} = -kx \Rightarrow \ddot{x} + \omega^2 x = 0, \omega^2 \equiv \frac{k}{\mu} \Leftrightarrow k = \mu\omega^2,$$

с решением

$$x = A\cos(\omega t + \varphi).$$

Для энергии имеем

$$E = \frac{\mu\dot{x}^2}{2} + kx^2/2 =$$

$$= \mu\omega^2 A^2/2\cdot\sin^2\omega t + kA^2/2\cdot\cos^2\omega t = \mu\omega^2 A^2/2.$$

Так как

$$\rangle x^2 \langle_{кл} = \frac{1}{T}\int_0^T x^2(t)dt = A^2\frac{1}{T}\int_0^T \cos^2\omega t dt = \tfrac{1}{2}A^2,$$

то можно также записать

$$E = \mu\omega^2\langle x^2\rangle_{кл}.$$

Квантовый осциллятор в координатном представлении

Гамильтониан имеет вид

$$\hat{H} = (\hat{p}^{\,2}/2\mu + \mu\omega^2 x^2/2),$$

и стационарное уравнение Шредингера записывается как

$$-\hbar^2/2\mu\cdot\psi''(x) + \mu\omega^2 x^2/2\cdot\psi(x) = E\cdot\psi(x).$$

К нему нужно добавить единственное граничное условие:

$$|\psi(x)| < +\infty, \quad (x \to \pm\infty).$$

Вводя безразмерные координату y и энергию ε:

$$y = x\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}, \ \varepsilon = 2E/\hbar\omega,$$

переписываем уравнение (это тривиально):

$$(d^2/dy^2 - y^2 + \varepsilon)\cdot\psi(y) = 0.$$

Легко показать (отбрасывая член с $\varepsilon\psi(y)$), что асимптотика решения такова:

$$\psi(x) \underset{x\to\pm\infty}{\approx} Ae^{-\frac{1}{2}y^2} + Be^{\frac{1}{2}y^2},$$

причем из граничного условия B=0. Поэтому, чтобы привести уравнение к стандартному виду, делаем замену неизвестной функции:

$$\psi(y) = e^{-\frac{1}{2}y^2}U(y).$$

Для функции $U(y)$ получается уравнение

$$U'' - 2yU' + (\varepsilon-1)U = 0$$

с граничным условием

$$U(y) \Rightarrow 0 \text{ (быстрее, чем возрастает } e^{\frac{1}{2}y^2}\text{),.}$$

Выписанное уравнение называется уравнением Эрмита. Так как y=0 - регулярная точка, решение можно искать в виде степенного ряда:

$$U(y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k y^k .$$

Дифференцируем его и подставляем в уравнение:

$$\sum_{\kappa=0}^{\infty} \{a_k(k-1)ky^{k-2} - a_k(2k+1-\varepsilon)y^k\} = 0,$$

или

$$\sum_{k=0}^{\infty}\{ a_{k+2}(k+1)(k+2)-a_k(2k+1-\varepsilon)\}y^k = 0,$$

откуда

$$a_{k+2}(k+1)(k+2)-a_k(2k+1-\varepsilon) = 0,$$

и получаем рекуррентное соотношение для коэффициентов:

$$a_{k+2} = \{(2k+1-\varepsilon)/(k+1)(k+2)\}\ a^k.$$

Если ряд бесконечный, то при больших y

$$\frac{a_k}{a_{k+2}} = \frac{(k+1)(k+2)}{2k+1-\varepsilon} \approx \frac{k}{2},$$

т.е. отношение соседних коэффициентов такое же, как в разложении

$$e^{y^2} = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}y^{2k} = \sum_{k=0,2,...}\frac{1}{(\frac{k}{2})!}y^k\ .$$

Это решение не удовлетворяет граничному условию. Поэтому ряд должен где-то оборваться. Тогда он будет *конечным полиномом*, из-за множителя $e^{-\frac{1}{2}y^2}$ функция $\Psi(y)$ будет быстро убывать при $y \to \pm\infty$, и она будет квадратично интегрируемой.

Как же добиться того, чтобы $U(y)$ было конечным полиномом?

Пусть

$$n = \max\{k\} \Leftrightarrow a_n\neq 0, a_{n+2} = 0.$$

Тогда из рекуррентного соотношения

$$2n+1-\varepsilon = 0.$$

Но этого еще не достаточно. Нужно еще потребовать, чтобы $a_{n+1}=0$.

Этот коэффициент выражается через a_{n-1}:

$$a_{n+1} = \{2(n-1)+1-\varepsilon/n(n+1)\}\cdot a_{n-1}.$$

Если бы числитель дроби равнялся нулю, то все было бы хорошо. Но в силу предыдущего

$$2(n-1)+1-\varepsilon = [2n+1-\varepsilon]-2 = -2 \neq 0.$$

Поэтому нужно потребовать $a_{n-1}=0$, а также $a_{n-3}=0$, и так далее, пока не дойдем до $a_0=0$ или $a_1=0$. Ясно, что при n четном должно быть $a_1=0$, а при n нечетном - $a_0=0$, В любом случае условие обрыва ряда, т.е. превращения его в полином, имеет вид

$$2n+1-\varepsilon = 0 \ \Rightarrow\ \varepsilon = 2n+1,$$

откуда, вспоминая, что

$$\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega},$$

получаем *энергетический спектр* гармонического осциллятора:

$$E_n = \hbar\omega\cdot(n+1/2),\ n = 0,1,2,...$$

Из предыдущего явствует, что если n четно, то a_1=0, и все a_{2k+1}=0, а потому волновая функция - четная:

$$\Psi_{2k}(-x) = +\Psi_{2k}(x).$$

Если же n-нечетно, то a_0=0, все a_{2k}=0, и волновая функция нечетна:

$$\Psi_{2k+1}(-x) = -\Psi_{2k+1}(x).$$

Если положить a_0=1, a_1=0 для одного набора решений и a_0=0, a_1=1 для другого набора, то получим полиномы Эрмита:

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

Тогда волновые функции стационарных состояний будут *функциями Эрмита*:

$$\psi_n(y) = A_n e^{-\frac{y^2}{2}} H_n(y),$$

где константы A_n следует определить из условия нормировки

$$\int \Psi|(y)|^2 dy = 1 \quad \text{или} \quad \int \Psi|(x)|^2 dx = 1.$$

Второе условие более физично, и оно окончательно дает

$$\psi_n(x) = \sqrt[4]{\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\frac{\mu\omega}{2\hbar}x^2} H_n\left(\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}x\right).$$

ЧЕТНОСТЬ

Мы получили, что волновые функции стационарных состояний осциллятора являются или четными или нечетными. Оказывается, этот результат можно было предсказать заранее, не решая задачу. Сделаем в этой связи отступление, которое представляет и значительный самостоятельный интерес.

Рассмотрим преобразование пространственной инверсии системы координат

$$\mathbf{r} \to \mathbf{r}' = -\mathbf{r}$$

и введем оператор пространственной четности $\hat{P}$, действующий на волновые функции в координатном представлении по закону

$$\hat{P}\,\Psi(\mathbf{r}) = \Psi(-\mathbf{r}).$$

Рассмотрим теперь функцию

$$\varphi(\mathbf{r}) = \hat{F}(\mathbf{r})\,\Psi(\mathbf{r})$$

и подействуем на нее оператором $\hat{P}$:

$$\hat{P}\,\varphi(\mathbf{r}) = \hat{P}\{\hat{F}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})\} = \{\hat{P}\hat{F}(\mathbf{r})\}\psi(\mathbf{r}) == \varphi(-\mathbf{r}) = \hat{F}(-\mathbf{r})\psi(-\mathbf{r}) = \hat{F}(-\mathbf{r})\hat{P}\,\psi(\mathbf{r}),$$

откуда

$$\hat{\mathrm{P}}\,\hat{F}(\mathbf{r}) = \hat{F}(-\mathbf{r})\,\hat{\mathrm{P}}\,.$$

В частности, если гамильтониан есть четная функция $\boldsymbol{r}$, а для этого достаточно, чтобы таковой была потенциальная энергия:

$$V(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) \quad \Rightarrow \quad \hat{H}(-\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r}),$$

то из предыдущего он будет коммутировать с оператором четности:

$$[\hat{H}, \hat{\mathrm{P}}] = 0,$$

а значит $\hat{\mathrm{P}}$ будет *интегралом движения*.

Докажем, что оператор $\hat{\mathrm{P}}$ описывает некоторую динамическую переменную (она называется пространственной четностью). Для этого надо доказать, что он эрмитов. Имеем:

$$(\Psi(\mathbf{r}), \hat{\mathrm{P}}\,\Psi(\mathbf{r})) = \int \Psi^*(\mathbf{r})\ \hat{\mathrm{P}}\,\Psi(\mathbf{r})dV =$$

$$= \int \Psi^*(\mathbf{r})\ \Psi(-\mathbf{r})dV \xrightarrow{\mathbf{r}\to-\mathbf{r}} \int \Psi^*(-\mathbf{r})\ \Psi(\mathbf{r})dV =$$

$$= \int \{\hat{\mathrm{P}}\,\Psi^*(\mathbf{r})\}^*\ \Psi(\mathbf{r})dV = (\hat{\mathrm{P}}\,\Psi, \Psi),$$

что и утверждалось. Найдем возможные значения этой наблюдаемой, т.е. собственные значения P оператора $\hat{\mathrm{P}}$:

$$\hat{\mathrm{P}}\,\Psi_p = P\,\Psi_p.$$

Действуем еще раз оператором $\hat{\mathrm{P}}$:

$$\hat{\mathrm{P}}\,\{\hat{\mathrm{P}}\,\Psi_p(\mathbf{r})\} = \hat{\mathrm{P}}\,\{P\Psi_p(\mathbf{r})\}.$$

Слева получим

$$\hat{\mathrm{P}}\,\{\hat{\mathrm{P}}\,\Psi_p(\mathbf{r})\} = \hat{\mathrm{P}}\,\Psi_p(-\mathbf{r}) = \Psi_p(\mathbf{r}),$$

а справа

$$\hat{\mathrm{P}}\,\{P\Psi_p(\mathbf{r})\} = P\{\hat{\mathrm{P}}\,\Psi_p(\mathbf{r})\} = P\{P\Psi_p(\mathbf{r})\} = P^2\Psi_p(\mathbf{r}).$$

Таким образом,

$$\Psi_p(\mathbf{r}) = P^2\Psi_p(\mathbf{r}),$$

откуда

$$P = \pm 1.$$

Таким образом, у оператора $\hat{\mathrm{P}}$ имеется лишь два собственных значения, которым соответствуют четные и нечетные собственные функции:

$$P = +1: \quad \Psi_+(-\mathbf{r}) = +\,\Psi_+(\mathbf{r}),$$

$$P = -1: \quad \Psi_-(-\mathbf{r}) = -\,\Psi_-(\mathbf{r}).$$

Эти собственные значения также называются четностью (*пространственной*, так как в физике элементарных частиц используют и другие четности).

Если четность есть интеграл движения, т.е.

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0,$$

(см. выше), то из

$$\hat{H}\Psi_E = E\Psi_E$$

следует

$$\hat{P}(\hat{H}\Psi_E) = (\hat{P}\hat{H})\Psi_E = (\hat{H}\hat{P})\Psi_E = \hat{H}(\hat{P}\Psi_E) = E(\hat{P}\Psi_E)$$

Таким образом, если Ψ_E - волновая функция стационарного состояния с энергией E, то таковой будет и функция $\hat{P}\Psi_E$. Если энергетический спектр простой (невырожденный), т.е. если каждому E отвечает одна (с точностью до множителя) волновая функция, то $\hat{P}\psi_E$ и Ψ_E должны быть пропорциональны друг другу:

$$\hat{P}\Psi_E = P\Psi_E,$$

а это значит, что Ψ_E есть собственная функция оператора $\hat{P}$, т.е. обладает определенной четностью.

Вывод: если гамильтониан есть четная функция координат, то он коммутирует с оператором $\hat{P}$, т.е. $\hat{P}$ - интеграл движения; если к тому же энергетический спектр - простой, то каждое стационарное состояние обладает определенной четностью, т.е. его волновая функция или четна, или нечетна.

Для одномерного гармонического осциллятора все условия выполняются: потенциальная энергия четна, а энергетический спектр - простой (в одномерном случае дискретный спектр всегда простой). Поэтому волновые функции стационарных состояний осциллятора - четные или нечетные.

СРАВНЕНИЕ КВАНТОВОГО И КЛАССИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРОВ

Вернемся к квантовому осциллятору и сравним его поведение с поведением классического осциллятора.

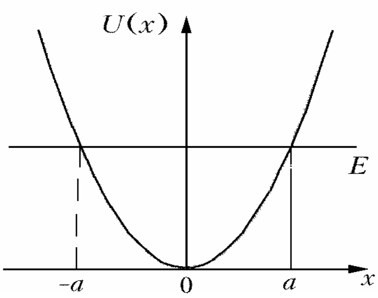
1. Энергия квантового осциллятора квантуется, т.е. принимает дискретный ряд значений

$$E_n = \hbar\omega(n+1/2), \quad n = 0,1,2,...$$

Энергия классического осциллятора может иметь любое значение

$$E = 1/2\mu\omega^2 A^2,$$

определяемое амплитудой A.



2. Минимальное значение энергии квантового осциллятора больше минимального значения потенциальной энергии:

$$E^{\text{кв}}_{\min} = E_0 = \hbar\omega/2 > V_{\min} = 0.$$

Эта энергия называется *энергией нулевых колебаний*. Для классического осциллятора минимальная энергия равна нулю, т.е. минимальной потенциальной энергии, - никаких «нулевых колебаний» нет.

3. Классический осциллятор совершает строго финитное движение между точками $-a$ и $+a$, определяемыми из условия

$$E = V(\pm a) = 1/2\mu\omega^2 a^2.$$

Волновая функция квантового осциллятора имеет общий вид

$$\psi(y) = e^{-\frac{y^2}{2}} u(y).$$

Здесь существует ненулевая вероятность обнаружить частицу в классически недоступной области. Правда, эта вероятность чрезвычайно быстро (как $\exp(-y^2)$) стремится к нулю при возрастании $|x|$, а потому часто говорят, что и движение квантового осциллятора является финитным (точнее, оно есть аналог классического финитного движения).

ДРУГОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О КВАНТОВОМ ОСЦИЛЛЯТОРЕ

Вернемся к квантовому осциллятору с гамильтонианом

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + 1/2\mu\omega^2 \hat{x}^2.$$

Перепишем его, вводя вместо $\hat{x}$ и $\hat{p}$ новые операторы

$$\hat{a}_\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{\hat{x}}{x_0} \mp i\frac{x_0}{\hbar}\hat{p}\right), \quad x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}},$$

связанные друг с другом операцией сопряжения:

$$\hat{a}_+^+ = \hat{a}_-, \qquad \hat{a}_-^+ = \hat{a}_+.$$

Из коммутационного соотношения

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\hat{I}$$

сразу следует, что

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \hat{I},$$

(это проверяется прямой подстановкой). Кроме того, выражая $\hat{x}$ и $\hat{p}$ через $\hat{a}_-$ и $\hat{a}_+$ и подставляя результаты в $\hat{H}$, получим

$$\hat{H} = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\hat{I}).$$

Отсюда элементарно проверяются коммутационные соотношения

$$[\hat{H}, \hat{a}_+] = \hbar\omega\,\hat{a}_+; \quad [\hat{H}, \hat{a}_-] = -\hbar\omega\,\hat{a}_-.$$

Пусть ψ_n- собственная функция $\hat{H}$ с собственным значением E_n:

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n.$$

Тогда

$$\hat{a}_-\psi_n$$

или 0, или собственная функция $\hat{H}$ с собственным значением $E_n - \hbar\omega$. Действительно, используя коммутатор $\hat{H}$ с $\hat{a}_-$, имеем:

$$\hat{H}(\hat{a}_-\psi_n) = (\hat{H}\hat{a}_-)\psi_n = (\hat{a}_-\hat{H} - \hbar\omega\hat{a}_-)\psi_n =$$
$$= (\hat{a}_- E_n - \hbar\omega\hat{a}_-)\psi_n = (E_n - \hbar\omega)(\hat{a}_-\psi_n).$$

Аналогично устанавливается второе утверждение. По этой причине $\hat{a}_-$ называется *понижающим оператором*, а $\hat{a}_+$ -*повышающим оператором*.

Но энергетический спектр осциллятора ограничен снизу - есть минимальная энергия E_0, которой отвечает собственная функция ψ_0 гамильтониана. Дальше понижать некуда, и должно быть

$$\hat{a}_-\psi_0 = 0.$$

Действуем на эту функцию гамильтонианом:

$$\hat{H}\psi_0 = \hbar\omega(\hat{a}_+\hat{a}_- + \frac{1}{2}\hat{I})\psi_0 = 0 + \hbar\omega\frac{1}{2}\hat{I}\psi_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega\psi_0.$$

Таким образом,

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega.$$

Функция ψ_0 есть волновая функция *основного состояния* (его называют также вакуумным состоянием). Она должна быть нормирована:

$$(\psi_0, \psi_0) = 1.$$

Действуя на нее последовательно оператором $\hat{a}_+$, будем получать волновые функции новых стационарных состояний, повышая энергию каждый раз на $\hbar\omega$. Придем к последовательности энергий

$$\frac{1}{2}\hbar\omega,\ \frac{1}{2}\hbar\omega + \hbar\omega,\ \frac{1}{2}\hbar\omega + 2\hbar\omega, ...$$

т.е.

$$E_0 = \hbar\omega(n+1/2).$$

Волновая функция стационарного состояния с E_n есть

$$\psi_n = c_n(\hat{a}_+)^n\psi_0,$$

где c_n- нормировочные постоянные. Для таких функций

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n,\ E_n = \hbar\omega(\mathrm{n}+1/2).$$

Записывая