5. Гармонический осциллятор.

Основные формулы: $$\hat{H}=\frac{\hat{P}^2}{2m}+\frac{m\omega^2\hat{X}^2}{2}$$

$$\boxed{\hat{X}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^{+}+\hat{a}\right),\quad \hat{P}=i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{a}^{+}-\hat{a}\right)}$$

$$\hat{H}=\hbar\omega\left(\hat{a}^{+}\hat{a}+\frac{1}{2}\hat{I}\right)$$

$$\boxed{\begin{gathered}\psi_n=\frac{\left(\hat{a}^{+}\right)^n}{\sqrt{n!}}\psi_0\\ \hat{a}\psi_0=0\end{gathered}}\qquad \hat{H}\psi_n=E_n\psi_n \qquad \psi_0(x)=\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\cdot e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.$$

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\qquad \boxed{\left(\psi_m,\psi_n\right)=\delta_{mn}}.$$

$$\boxed{\begin{gathered}\hat{a}^{+}\psi_n=\sqrt{n+1}\psi_{n+1}\\ \hat{a}\psi_n=\sqrt{n}\psi_{n-1}\end{gathered}}$$

1. Вычислить среднее значение координаты в состоянии ψ_n

Решение: $\langle x\rangle_n=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\langle a^{+}+a\rangle_n=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\left(\psi_n,\hat{a}^{+}\psi_n\right)+\left(\psi_n,\hat{a}\psi_n\right)\right\}=$

$$=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\sqrt{n+1}\left(\psi_n,\psi_{n+1}\right)+\sqrt{n}\left(\psi_n,\psi_{n-1}\right)\right\}=0,\quad \boxed{\langle x\rangle_n=0}\quad .$$

2. Вычислить среднее значение импульса в состоянии ψ_n

Ответ: $\langle P\rangle_n=0$

3. Вычислить дисперсию координаты в основном состоянии.

Решение:

$$D_0(x)=\langle x^2\rangle_0-\langle x\rangle_0^2=\langle x^2\rangle_0=\frac{\hbar}{2m\omega}\left\langle\left(\hat{a}^{+}+\hat{a}\right)^2\right\rangle_0=$$

$$=\frac{\hbar}{2m\omega}\left\{\langle a^{+2}\rangle_0+\langle a^2\rangle_0+\langle a^{+}a\rangle_0+\langle aa^{+}\rangle_0\right\}=$$

$$=\frac{\hbar}{2m\omega}\left\{\left(\psi_0,\hat{a}^{+2}\psi_0\right)+\cancel{\left(\psi_0,\hat{a}^2\psi_0\right)}+\cancel{\left(\psi_0,\hat{a}^{+}\hat{a}\psi_0\right)}+\left(\psi_0,\hat{a}\hat{a}^{+}\psi_0\right)\right\}=$$

$$=\frac{\hbar}{2m\omega}\left\{\left(\hat{a}\psi_0,\hat{a}^{+}\psi\right)+\left(\psi_0,\hat{a}\psi_1\right)\right\}=\frac{\hbar}{2m\omega}\left(\psi_0,\psi_0\right)=\frac{\hbar}{2m\omega}\ :\ \boxed{D_0(x)=\frac{\hbar}{2m\omega}}\ .$$

Эта величина отвечает «протяженности», или ширине волнового пакета, т.е. волновой функции основного состояния, которую теперь можно записать как

$$\psi_0(x)=\sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\cdot e^{-\frac{x^2}{4D_0(x)}}.$$

Проведенная выкладка заменяет вычисление по частям интеграла типа

$$\int x^2e^{-\alpha x^2}dx$$

4. Вычислить дисперсию импульса в основном состоянии.

Ответ: $D_0(P)=\frac{m\hbar\omega}{2}$

5. Вычислить дисперсию координаты в состоянии ψ_n

Ответ: $D_n(x) = \dfrac{\hbar}{2m\omega}(2n+1)$.

6. Вычислить дисперсию импульса в состоянии ψ_n

Решение: $D_n(P) = \left\langle P^2 \right\rangle_n - \left\langle P \right\rangle_n^2 = -\dfrac{m\hbar\omega}{2}\left\langle \left(\hat{a}^+ - \hat{a}\right)^2 \right\rangle_n =$

$$= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left\{\left\langle a^{+2}\right\rangle_n + \left\langle a^2\right\rangle_n - \left\langle a^+ a\right\rangle_n - \left\langle a a^+\right\rangle_n\right\} =$$

$$= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left\{\left(\psi_n, \hat{a}^{+2}\psi_n\right) + \left(\psi_n, \hat{a}^2\psi_n\right) - \left(\psi_n, \hat{a}^+\hat{a}\psi_n\right) - \left(\psi_n, \hat{a}\hat{a}^+\psi_n\right)\right\} =$$

$$= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left\{\left(\hat{a}\psi_n, \hat{a}^+\psi_n\right) + \left(\hat{a}^+\psi_n, \hat{a}\psi_n\right) - \left(\psi_n, \hat{N}\psi_n\right) - \left(\hat{a}^+\psi_n, \hat{a}^+\psi_n\right)\right\} =$$

$$= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left\{\cancel{\sqrt{n}\sqrt{n+1}\left(\psi_{n-1}, \psi_{n+1}\right)}^{=0} + \cancel{\sqrt{n+1}\sqrt{n}\left(\psi_{n+1}, \psi_{n-1}\right)}^{=0} - \right.$$

$$\left. - n\left(\psi_n, \psi_n\right) - \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\left(\psi_n, \psi_n\right)\right\} =$$

$$= -\frac{m\hbar\omega}{2}\left\{-n-(n+1)\right\} = -\frac{m\hbar\omega}{2}\left(-2n-1\right) : \boxed{D_n(P) = \frac{m\hbar\omega}{2}\left(2n+1\right)} .$$

7. Проверить выполнимость соотношения неопределенностей для стационарных состояний осциллятора.

Решение:

$$D_n(x)\cdot D_n(P) = \frac{\hbar}{2m\omega}\left(2n+1\right)\cdot\frac{m\hbar\omega}{2}\left(2n+1\right) = \frac{\hbar^2}{4}\left(2n+1\right)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} .$$

При $n = 0$, т.е. для основного состояния, соотношение неопределенностей минимизируется – превращается в равенство.

8. Вычислить матрицу оператора координаты $X_{nk} \equiv \left(\psi_n, \hat{X}\psi_k\right)$.

Решение:

$$X_{nk} \equiv \left(\psi_n, \hat{X}\psi_k\right) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\psi_n, \left(\hat{a}^+ + \hat{a}\right)\psi_k\right) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\left(\psi_n, \hat{a}^+\psi_k\right) + \left(\psi_n, \hat{a}\psi_k\right)\right\} =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\sqrt{k+1}\left(\psi_n, \psi_{k+1}\right) + \sqrt{k}\left(\psi_n, \psi_{k-1}\right)\right\} :$$

$$X_{nk} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{k+1}\cdot\delta_{n,k+1} + \sqrt{k}\cdot\delta_{n,k-1}\right).$$

Отличны от нуля лишь матричные элементы с $k = n-1$ и с $k = n+1$:

$$X_{n,n-1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cdot\sqrt{n} , \quad X_{n,n+1} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cdot\sqrt{n+1} : \ n = 0,1,2,...$$

Подобная матрица имеет якобиевый вид:

$$X_{nk} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\cdot\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & . & . & . \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & . & . & . \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & . & . & . \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . \\ . & . & . & . & . & . & . & . \end{pmatrix}$$

9. Вычислить диагональные матричные элементы оператора $\hat{X}^4$.

Решение: $\left(X^4\right)_{nn} = \left\langle x^4 \right\rangle_n = \dfrac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\left\langle \left(\hat{a}^+ + \hat{a}\right)^4 \right\rangle_n =$

$$= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\left\langle \left(\hat{a}^{+2} + \hat{a}^2 + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+\right)\left(\hat{a}^{+2} + \hat{a}^2 + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+\right) \right\rangle_n =$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\Big\langle \cancel{a^{+4}} + a^{+2}a^2 + \cancel{a^{+3}a} + \cancel{a^{+2}\cdot aa^+} + a^2a^{+2} + \cancel{a^4} + \cancel{a^2a^+a} + \cancel{a^3a^+} +$$

$$+ \cancel{a^+aa^{+2}} + \cancel{a^+a^3} + a^+aa^+a + a^+a^2a^+ + \cancel{aa^{+3}} + \cancel{aa^+a^2} + aa^{+2}a + aa^+aa^+ \Big\rangle_n =$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\Big\{ \left(\psi_n, \hat{a}^{+2}\hat{a}^2\psi_n\right) + \left(\psi_n, \hat{a}^2\hat{a}^{+2}\psi_n\right) + \left(\psi_n, \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\psi_n\right) +$$

$$+ \left(\psi_n, \hat{a}^+\hat{a}^2a^+\psi_n\right) + \left(\psi_n, \hat{a}\hat{a}^{+2}\hat{a}\psi_n\right) + \left(\psi_n, \hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\psi_n\right) \Big\} =$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\Big\{ \sqrt{n}\sqrt{n-1}\sqrt{n-1}\sqrt{n} + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\sqrt{n+2}\sqrt{n+1} + \sqrt{n}\sqrt{n}\sqrt{n}\sqrt{n} +$$

$$+ \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\sqrt{n}\sqrt{n} + \sqrt{n}\sqrt{n}\cdot\sqrt{n+1}\sqrt{n+1} + \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\sqrt{n+1} \Big\} =$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\left\{ n(n-1) + (n+1)(n+2) + n^2 + n(n+1) + n(n+1) + (n+1)^2 \right\} =$$

$$= \frac{\hbar^2}{4m^2\omega^2}\left(6n^2 + 6n + 3\right) : \quad \boxed{\left(x^4\right)_{nn} = \frac{3}{2}\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}\left(n^2 + n + \frac{1}{2}\right)} \ .$$

10. Найти энергетический спектр частицы, движущейся в поле

$$u(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0 \\ \dfrac{kx^2}{2}, & x \ge 0\,. \end{cases}$$

Решение: Теперь задача ставится не на всей прямой , а на полупрямой (0, ∞), причем добавляется граничное условие $\psi(0) = 0$. Уравнение при $x > 0$ совпадает с осцилляторным и имеет те же ограниченные решения. Волновые функции с $n = 2k$ четны и не обращаются в нуль при $x = 0$, а волновые функции с $n = 2k - 1$ (k = 1, 2, …) нечетны и обращаются в нуль при $x = 0$. Только они и удовлетворяют дополнительному граничному условию. Таким образом, из всех энергетических уровней осциллятора «выживают» только нечетные. Значения энергии получаются из осцилляторной формулы $E_n = \hbar\omega\left(n + \dfrac{1}{2}\right)$ заменой $n \to 2n - 1$:

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(2n - \frac{1}{2}\right), \quad n = 1, 2, 3, ...} \ .$$

6. Приближенные методы.

Если $\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{\mathscr{H}}$, причем решение задачи с $\hat{H}^{(0)}$ известно, а $\hat{\mathscr{H}}$ содержит малый параметр, то решение точной задачи можно искать по теории возмущений. В ее первом порядке

$$\Delta E_n^{(1)} = \mathscr{H}_{nn} \equiv \left(\psi_n^{(0)}, \hat{\mathscr{H}}\psi_n^{(0)}\right) \ .$$

Во втором порядке теории возмущений

$$\Delta E_n^{(2)} = \sum_m \frac{\mathcal{H}_{nm}\mathcal{H}_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

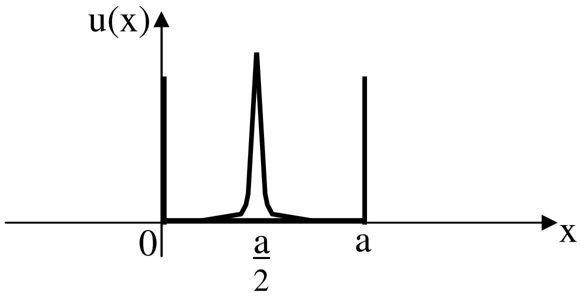
В вариационном методе энергия основного состояния оценивается как

$$E_0 \cong \min\left\{\langle H\rangle_\psi\right\},$$

где ψ - пробная функция, содержащая параметры.

1. Частица находится в бесконечной прямоугольной потенциальной яме, на которую наложен дельта-образный потенциал

$$\tilde{u} = \alpha \cdot \delta\left(x - \frac{a}{2}\right), \quad \alpha > 0$$



Найти энергетический спектр частицы в первом порядке теории возмущений.

Решение: $\hat{H} = \hat{u}$; $E_n^{(0)} = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$, $\psi_n^{(0)} = \sqrt{\dfrac{2}{a}} \cdot \sin\dfrac{\pi n}{a}x$;

$$\Delta E_n = \left(\psi_n^{(0)}, \hat{\mathcal{H}}\psi_n^{(0)}\right);$$

$$\Delta E_n = \int_0^a \psi_n^*(x)\cdot\tilde{u}(x)\psi_n(x)dx = \frac{2}{a}\alpha\int_0^a \delta\left(x - \frac{a}{2}\right)\sin^2\frac{\pi n}{a}xdx =$$

$$= \frac{2\alpha}{a}\cdot\sin^2\frac{\pi n}{a}\cdot\frac{a}{2} = \frac{2\alpha}{a}\cdot\sin^2\frac{\pi n}{2} = \begin{cases} \dfrac{2\alpha}{a}, & n \text{ - нечетн.} \\ 0, & n \text{ - четн.} \end{cases}$$

$$\boxed{E_n = \begin{cases} \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2 + \dfrac{2\alpha}{a}, & n \text{ - нечетн.} \\ \dfrac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2, & n \text{ - четн.} \end{cases}}\ .$$

Ответ совпадает с результатом точного решения. Отсутствие поправки к четным уровням понятно: дельта-функция «гасится» нулем волновой функции, который она имеет посередине ямы.

2. Частица находится в бесконечной прямоугольной потенциальной яме, внутри которой имеется прямоугольный барьер высотой u_0 и шириной b . Найти энергетический спектр частицы в первом порядке теории возмущений.

Решение: $\Delta E_n = \dfrac{2}{a}u_0\displaystyle\int_{-\frac{a}{2}-\frac{b}{2}}^{\frac{a}{2}+\frac{b}{2}}\sin^2\frac{\pi n}{a}xdx = \frac{u_0}{a}\int_{-\frac{a}{2}-\frac{b}{2}}^{\frac{a}{2}+\frac{b}{2}}\left(1 - \cos\frac{2\pi n}{a}x\right)dx =$

$$=\frac{u_0}{a}\left\{x-\frac{a}{2\pi n}\sin\frac{2\pi n}{a}x\right\}_{-\frac{a}{2}-\frac{b}{2}}^{\frac{a}{2}+\frac{b}{2}}=\frac{u_0}{a}\left\{b-\frac{a}{\pi n}\sin\frac{\pi n}{a}(a+b)\right\}=$$

$$=\frac{u_0}{a}\left\{b-\frac{a}{\pi n}\sin\left(\pi n+\pi n\frac{b}{a}\right)\right\}=\frac{u_0}{a}\left\{b-\frac{a}{\pi n}(-1)^{n+1}\cos\left(\pi n\frac{b}{a}\right)\right\}=$$

$$=u_0\frac{b}{a}+u_0\frac{(-1)^n}{\pi n}\cos\left(\pi n\frac{b}{a}\right):$$

$$\boxed{E_n=\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2+u_0\frac{b}{a}+u_0\frac{(-1)^n}{\pi n}\cos\left(\pi n\frac{b}{a}\right)}.$$

3. На гармонический осциллятор с собственной частотой ω_0 наложено дополнительное слабое поле $\tilde{u}(x)=\alpha x^2\cdot\frac{1}{2}$. Найти поправки к энергетическому спектру в первом порядке теории возмущений. Сравнить ответ с результатом точного расчета.

Решение:

Здесь $\hat{H}^{(0)}=\frac{\hat{P}^2}{2m}+\frac{m\omega^2x^2}{2}$, $E_n^{(0)}=\hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right)$; $\mathscr{H}=\frac{\alpha x^2}{2}$.

Взяв величину $\left\langle x^2\right\rangle_n$ из задачи 5.5

$$\left\langle x^2\right\rangle_n=D_n(x)=\frac{\hbar}{2m\omega_0}(2n+1),$$

найдем

$$\Delta E_n=\left\langle\mathscr{H}\right\rangle_n=\frac{\alpha}{2}\left\langle x^2\right\rangle_n=\frac{\alpha}{2}\frac{\hbar}{2m\omega_0}(2n+1)=\frac{\alpha\hbar}{2m\omega_0}\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

т.е.

$$\boxed{E_n\cong\left(\hbar\omega_0+\frac{\alpha\hbar}{2m\omega_0}\right)\cdot\left(n+\frac{1}{2}\right)}.$$

Точный результат можно получить сразу, замечая, что вся система в целом представляет собой гармонический осциллятор с частотой

$$\omega=\sqrt{\frac{k+\alpha}{m}}=\sqrt{\frac{k}{m}+\frac{\alpha}{m}}=\sqrt{\omega_0^2+\frac{\alpha}{m}},$$

а потому

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)=\hbar\sqrt{\omega_0^2+\frac{\alpha}{m}}\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Разлагаем квадратный корень в ряд по малому параметру с точностью до членов первого порядка:

$$\sqrt{\omega_0^2+\frac{\alpha}{m}}=\omega_0\left(1+\frac{\alpha}{m\omega_0^2}\right)^{\frac{1}{2}}\cong\omega_0+\frac{1}{2}\frac{\alpha}{m\omega_0^2}.$$

В итоге получаем

$$E_n\cong\left(\hbar\omega_0+\frac{\alpha\hbar}{2m\omega_0}\right)\left(n+\frac{1}{2}\right),$$

т.е. в выбранном приближении оба результата совпадают.

4. В первом порядке теории возмущений найти энергетические уровни ангармонического осциллятора с гамильтонианом

$$\hat{H}=\frac{\hat{P}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{X}^2+\beta\hat{X}^4 .$$

Решение:

$$\hat{H}^{(0)}=\frac{\hat{P}^2}{2m}+\frac{m\omega^2\hat{X}^2}{2};\quad E_n^{(0)}=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right),\ \hat{\mathscr{H}}=\beta\cdot\hat{X}^4 ;$$

$$\Delta E_n=\mathscr{H}_{nn}=\beta\left(X^4\right)_{nn}=\beta\left\langle x^4\right\rangle_n=\beta\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{\hbar^2}{m^2\omega^2}\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right),\ (\text{см. } 5.9)$$

$$\boxed{E_n\cong\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)+\frac{3}{2}\frac{\beta\hbar^2}{m^2\omega^2}\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right)} .$$

5. Вычислить по теории возмущений энергетический спектр гармонического осциллятора с зарядом e , помещенного во внешнее однородное электростатическое поле ε. Сравнить результат с точным решением.

Решение:

$$\hat{H}^{(0)}=\frac{\hat{P}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{X}^2,\quad E_n^{(0)}=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right);\ \hat{\mathscr{H}}=-e\varepsilon X ;$$

$$\Delta E_n^{(1)}=\mathscr{H}_{nn}=-e\varepsilon X_{nn}=-e\varepsilon\left\langle x\right\rangle_n=0 ;$$

$$\Delta E_n^{(2)}=\sum_k{}'\frac{\mathscr{H}_{nk}\mathscr{H}_{kn}}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}=e^2\varepsilon^2\sum_k{}'\frac{X_{nk}X_{kn}}{\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\hbar\omega\left(k+\frac{1}{2}\right)}=$$

$$=\frac{e^2\varepsilon^2}{\hbar\omega}\sum_k{}'\frac{X_{nk}X_{kn}}{n-k}\overset{(8)}{=}\frac{e^2\varepsilon^2}{\hbar\omega}\left\{\frac{X_{n,n-1}X_{n-1,n}}{n-(n-1)}+\frac{X_{n,n+1}X_{n+1,n}}{n-(n+1)}\right\}=$$

$$=\frac{e^2\varepsilon^2}{\hbar\omega}\cdot\frac{\hbar}{2m\omega}\left\{\sqrt{n}\sqrt{n}-\sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\right\}=\frac{e^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}\left\{n-(n+1)\right\} :$$

$$\boxed{E_n\cong\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)-\frac{e^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}} .$$

Точное решение получим, переписывая гамильтониан как

$$\hat{H}=\frac{\hat{P}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\hat{X}^2-e\varepsilon\hat{X}=\frac{\hat{P}^2}{2m}+\frac{m\omega^2}{2}\left(\hat{X}-\frac{e\varepsilon}{m\omega^2}\hat{I}\right)^2-\frac{e^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}\hat{I} .$$

После сдвига по координате и отбрасывания константы получим обычный осциллятор с $E_n = E_n^{(0)}$. Наличие поля определяет лишь сдвиг энергии на $-\dfrac{e^2\varepsilon^2}{2m\omega^2}$, который точно совпадает с полученным по теории возмущений.

Тот же результат справедлив и для классического случая.

6. Найти энергетические уровни ангармонического осциллятора с точностью до $\hbar^2$

Указания:

В первом порядке теории возмущений вклад дает только член с βX^4 ($\left\langle x^3\right\rangle_n=0$ в силу нечетности $x^3\left|\psi_n^{(0)}\right|^2$), причем он имеет порядок $\hbar^2$.

Но вклад кубического члена во втором порядке также пропорционален $\hbar^2$

(а вклад βX^4 в этом порядке пропорционален $\hbar^3$). Расчет $\Delta E_n^{(2)}$ сводится к вычислению матричных элементов $\left(x^3\right)_{nm}$, что проще всего сделать в формализме операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$. В итоге получится

$$\Delta E_n^{(2)} = -\frac{15}{4}\hbar^2\frac{\alpha^2}{m^2\omega^4}\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right) .$$

Складывая этот член с $E_n^{(0)}$ и с $\Delta E_n^{(1)}$ из задачи 4, окончательно найдем:

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)+\hbar^2\left\{\frac{3}{2}\frac{\beta}{m^2\omega^2}\left(n^2+n+\frac{1}{2}\right)-\frac{15}{4}\frac{\alpha^2}{m^2\omega^4}\left(n^2+n+\frac{11}{30}\right)\right\}} .$$

7. Найти энергию основного состояния гармонического осциллятора с помощью вариационного метода.

Решение.

Энергия основного состояния оценивается так

$$E_0 = \min\langle H\rangle_\psi ,$$

где $\psi(x)$ - какая-то пробная функция, включающая параметры. Угадываем как можно более хорошую функцию. Она не имеет нулей (теорема об узлах) и четна в силу четности потенциала (нечетная имеет нуль). Кроме того, $\psi(x)$ должна быстро убывать при $x \to \pm\infty$. Наконец, так как потенциал регулярный, она должна быть гладкой. Всеми свойствами обладает

$$\psi(x) = A\cdot e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} ,$$

или, определяя A из условия нормировки,

$$\psi(x) = \sqrt[4]{\frac{\alpha}{\pi}}\cdot e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2} .$$

Находим среднее значение энергии как сумму средних значений кинетической энергии и потенциальной энергии :

$$\langle T\rangle_\psi = \left\langle -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\right\rangle_\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}\cdot\frac{d^2}{dx^2}e^{-\frac{1}{2}\alpha x^2}dx =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int\left(-\alpha+\alpha^2x^2\right)e^{-\alpha x^2}dx = \frac{\hbar^2\alpha}{2m}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int e^{-\alpha x^2}dx - \frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int x^2e^{-\alpha x^2}dx \equiv$$

$$\equiv \frac{\hbar^2\alpha}{2m}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}I_0 - \frac{\hbar^2}{2m}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}I_2 ;$$

$$\langle u\rangle_\psi = \left\langle\frac{m\omega^2}{2}x^2\right\rangle_\psi = \frac{m\omega^2}{2}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int x^2e^{-\alpha x^2}dx = \frac{m\omega^2}{2}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}I_2 .$$

Величина I_0 - интеграл Пуассона, а I_2 получается из него дифференцированием по параметру α , так что

$$I_0 = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}},\quad I_2 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^2}} .$$

Подстановка дает

$$\langle T\rangle_\psi = \frac{\hbar^2\alpha}{2m}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\cdot\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} - \frac{\hbar^2\cdot\alpha^2}{4m}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\cdot\frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar^2\alpha}{4m} ;$$

$$\langle u\rangle_\psi = \frac{m\omega^2}{2}\sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{m\omega^2}{4\alpha} .$$

И в результате

$$\langle H\rangle_\psi = \langle T\rangle_\psi + \langle u\rangle_\psi = \frac{\hbar^2\alpha}{4m} + \frac{m\omega^2}{4\alpha} \ .$$

Минимизируем по α :

$$0 = \langle H\rangle_\psi'(\alpha) = \frac{\hbar^2}{4m} - \frac{m\omega^2}{4}\cdot\frac{1}{\alpha_0^2} \Rightarrow \alpha_0 = \frac{m\omega}{\hbar} \ .$$

Для энергии основного состояния это дает

$$E_0 = \min\left\{\langle H\rangle_\psi(\alpha)\right\} = \langle H\rangle_\psi(\alpha_0) = \frac{\hbar^2}{4m}\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{m\omega^2}{4}\cdot\frac{\hbar}{m\omega} \ .$$

В итоге получаем результат точного расчета

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

Что связано с выбором уж очень хорошей пробной функции.