Данная серия методичек посвящается лучшему семинаристу по квантовой теории
Андрею Владимировичу Толоконникову

А.В.: Квантовая статистика – это топчик.

А.В.: Физики придумывают математические извращения, чтобы легче было!

Классический осциллятор – наиболее простая (и поэтому скучная) тема курса.

Не будем вспоминать ***вывод*** гармонического осциллятора – это было уже на 2 курсе, обсудим лишь итоги – формулы.

(1) Энергетический спектр: $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$

(2а) Операторы рождения и уничтожения по определению равны:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\hat{p} - i\omega m\hat{x}), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(\hat{p} + i\omega m\hat{x})$$

(2б) Операторы координаты и импульса через них выражаются как

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^+ + \hat{a}) = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^+ - \hat{a}) = i\frac{p_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ - \hat{a})$$

(3а) Гамильтониан через операторы координаты импульса:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}$$

(3б) Гамильтониан через операторы рождения и уничтожения:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} = \frac{1}{2}\hbar\omega(aa^+ + a^+a),$$

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

(4) Правила действия $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$:

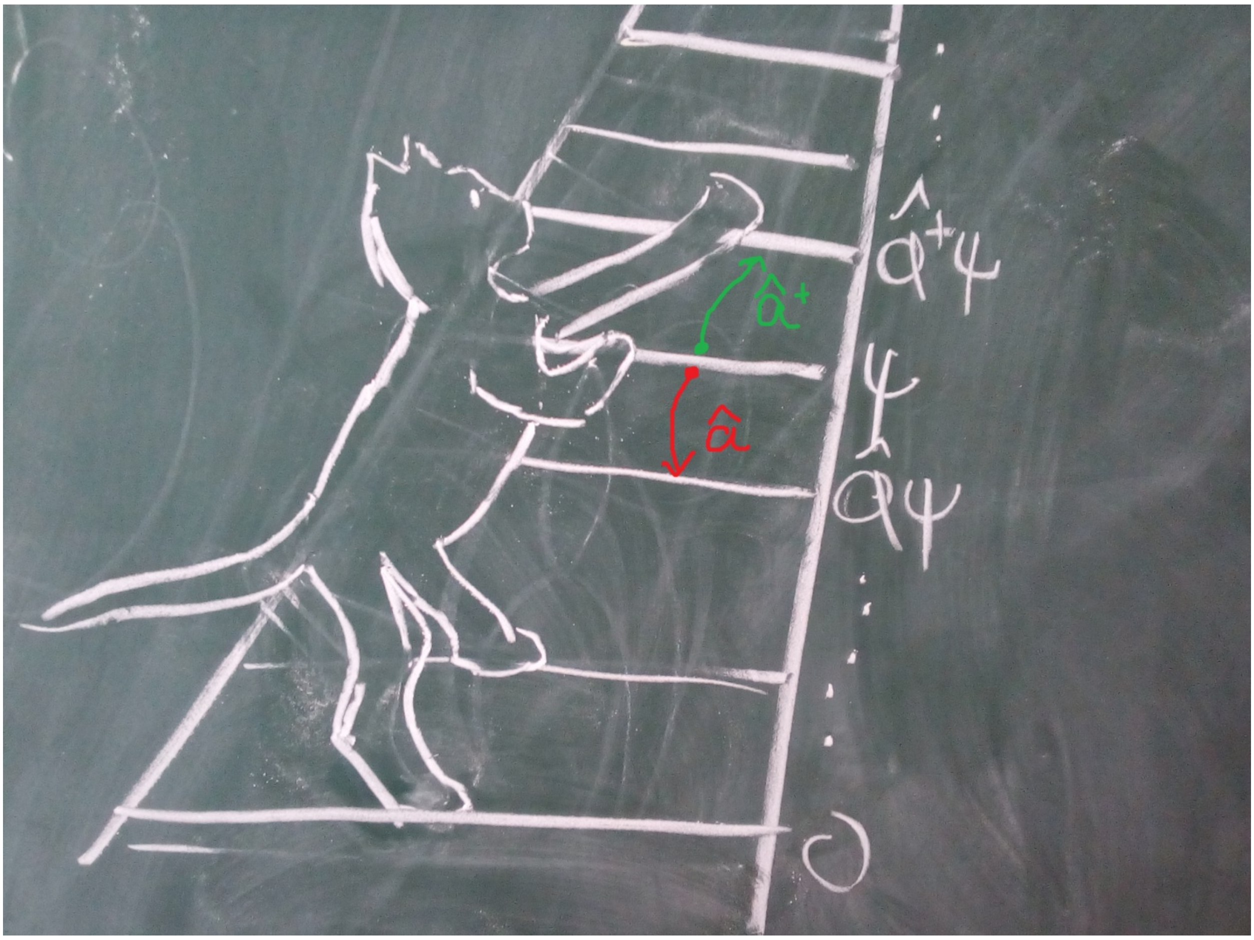
$$\hat{a}_+ |\psi_n> = \sqrt{n+1}\,|\psi_n>$$

$$\hat{a}\,|\psi_n> = \sqrt{n}\,|\psi_n>$$

Можно иначе записать:

$$\hat{a}|n> = \sqrt{n}|n-1>$$
$$\widehat{a^+}|n> = \sqrt{n+1}|n+1>$$

Т.е. операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ позволяют «скакать» между СФ гамильтониана: $\hat{a}^+$ вверх, а $\hat{a}$ вниз:



(рисунок Яникова Устина)
Пример использования:

$$\hat{a}|2> = \sqrt{2}|1>$$
$$\widehat{a^+}|2> = \sqrt{3}|3>$$

Оператор рождения $\widehat{a^+}$ апгрейдит ВФ, повышая уровень на 1, оператор уничтожения $\hat{a}$ понижает уровень на 1.
Также оба оператора домножают ВФ на коэф: $\hat{a}$ на корень из ***старого*** номера СФ, $\widehat{a^+}$ на корень из ***нового*** номера СФ.

Осцилляторная заповедь: решая задачи на гармонический осциллятор, вы должны переходить к операторам рождения и уничтожения. По сути, ***от вас требуется техника работы с*** $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$.

Задача 1. ***Найти средние значения энергии, координаты, дисперсии координаты, импульса, дисперсии импульса для СФ гамильтониана |n>.***

Начнём. Итак, у нас есть состояние |n>.
С энергией всё просто - $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$

Теперь про среднее значение координаты. Конечно, по самой известной формуле:

$$< \hat{A} > = < \Psi|\hat{A}|\Psi >$$

В данном случае

$$< \hat{x} > = < \Psi|\hat{x}|\Psi >$$

В атомке мы получали явный вид СФ гамильтониана в гармоническом осцилляторе. Писали вид ВФ через полиномы Эрмита. Можем подставить и вычислить интеграл

$$< x > = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_n(x) x \varphi_n(x) dx$$

Но уж больно противно и сложно будет, а на зачёте вы подобные задачи должны за 5 мин решать. Поэтому вспоминаем осцилляторную заповедь: переходим к операторам рождения и уничтожения $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$!

(Но да, по сути мы решаем задачу, которую мы уже умеем решать, другим способом. Говно, согласен (это не моя вина, а программы). Но выше я уже объяснил – на зачёте надо уметь решать подобное быстро без Эрмита и интегралов).

Учитываем (2б):

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^+ + \hat{a}\right) = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left(\hat{a}^+ + \hat{a}\right)$$

Получаем:

$$< \hat{x} > = \frac{x_0}{\sqrt{2}} < \Psi|\widehat{a^+} + \hat{a}|\Psi >$$

Теперь действуем на $|\Psi >$ по очереди то $\hat{a}$, то $\widehat{a^+}$. Вспоминаем (4):

$$\hat{a}|n > = \sqrt{n}|n-1 >$$
$$\widehat{a^+}|n > = \sqrt{n+1}|n+1 >$$

Складываем и подставляем:

$$< \hat{x} > = \frac{x_0}{\sqrt{2}} < n|(\sqrt{n}|n-1 > + \sqrt{n+1}|n+1 >)$$

Разобьём скалярное произведение:

$$< \hat{x} > = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\sqrt{n} < n|n-1 > + \sqrt{n+1} < n|n+1 >)$$

Но $< n|n-1 >$ и $< n|n+1 >$ равны 0 в силу ортогональности СФ гамильтониана! Значит, $< \hat{x} > = 0$.

Переходим к дисперсии координаты.. Возьмём известное равенство

$$\overline{\Delta x^2} = \overline{(x - \bar{x})^2} = \overline{x^2} - \bar{x}^2$$

Считаем среднее значение x^2:

$$<\widehat{x^2}> = <n|\widehat{x^2}|n>$$

Нужно дважды подействовать на $|n>$ оператором $\hat{x}$. Один раз уже подействовали, вот что получилось: (размерный множитель $\frac{x_0}{\sqrt{2}}$ опустим)

$$\sqrt{n}|n-1> + \sqrt{n+1}|n+1>$$

Действуем ещё раз:

$$\sqrt{n}\sqrt{n-1}|n-2> + \left(\sqrt{n}\sqrt{n} + \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\right)|n> + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}|n+2>$$

Т.е.

$$\sqrt{n}\sqrt{n-1}|n-2> + (2n+1)|n> + \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}|n+2>$$

Скалярно умножаем на $<n|$. Выживет только срединное слагаемое, потому что $|n-2>$ и $|n+2>$ ортогональны $<n|$.

Ответ (возвращаем размерный множитель $\frac{x_0}{\sqrt{2}}$ в квадрате):

$$<\widehat{x^2}> = \frac{x_0^2}{2}(2n+1)$$

Теперь переходим к импульсу. Там всё аналогично:

$$<\hat{p}> = \frac{ip_0}{\sqrt{2}} <n|\widehat{a^+} - \hat{a}|n>$$

Аналогично получаем $<\hat{p}> = 0$, считаем дисперсию:

$$\overline{p^2} = \cancel{<n|}, -\frac{p_0^2}{2} <n|a^{+2} - a^+a - aa^+ + a^2|n> = \frac{p_0^2}{2}(2n+1)$$

$$\sqrt{\Delta x^2 \Delta p^2} = \sqrt{\frac{x_0^2 p_0^2}{4}(2n+1)^2} = \sqrt{x_0^2 p_0^2 \left(n+\frac{1}{2}\right)^2} = \hbar\left(n+\frac{1}{2}\right) \geq \frac{\hbar}{2}$$

А вторая строчка – это уже подсчёт среднего геометрического дисперсий координаты и импульса (Андрей Владимирович убеждается, что оно больше ħ/2).

1,5. Про эволюцию ВФ

До этого мы всячески забивали на время. Ваапщета ВФ осциллирует по закону

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \Psi(\boldsymbol{r}) \exp\left(\frac{iEt}{\hbar}\right)$$

Применительно к гармоническому осциллятору, где $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$

$$|n>(t) = |n> \exp(\square i\omega(n + \frac{1}{2})t)$$

Но в первой задаче ничего от времени не зависит, потому что мы там везде считали среднее

$$< \hat{A} > = < n|\hat{A}|n >$$

и там за счёт того, что у бра $< n|$ фаза противоположна фазе кета $|n >$, временная зависимость от времени убивается.

Но так не всегда. Рассмотрим задачу 2:

Задача 2. Эволюция ВФ

В начальный момент времени

$$|\Psi > = \frac{1}{\sqrt{2}}\ |0 > + \frac{1}{\sqrt{2}}\ |1 >$$

Найти: эволюцию ВФ, средние значения энергий, координат и импульсов, а также их дисперсии.

Начнём с эволюции.

Как ВФ эволюционирует с течением времени? Каждая СФ гамильтонина домножается на exp(-iEt/ħ). Если ВФ есть СФ Гамильтониана (т.н. когерентное состояние), надо тупо домножить на $\exp(-iE_{\text{этого состояния}}t/\hbar)$. Если нет, то надо разложить по СФ Гамильтониана и каждую СФ домножить на $\exp(-iE_{\text{этого состояния}}t/\hbar)$.

Например, наша ВФ эволюционирует как $\frac{1}{\sqrt{2}} * \exp(-\frac{i\omega t}{2})\ |0>+\frac{1}{\sqrt{2}} * \exp(-\frac{3i\omega t}{2})\ |1>$.

Заметьте, что части ВФ осциллируют с разной частотой – чем больше энергия, тем больше частота. (В частности, для гигантских макроскопический энергий колебания настолько частые, что мы их и не видим ☺)

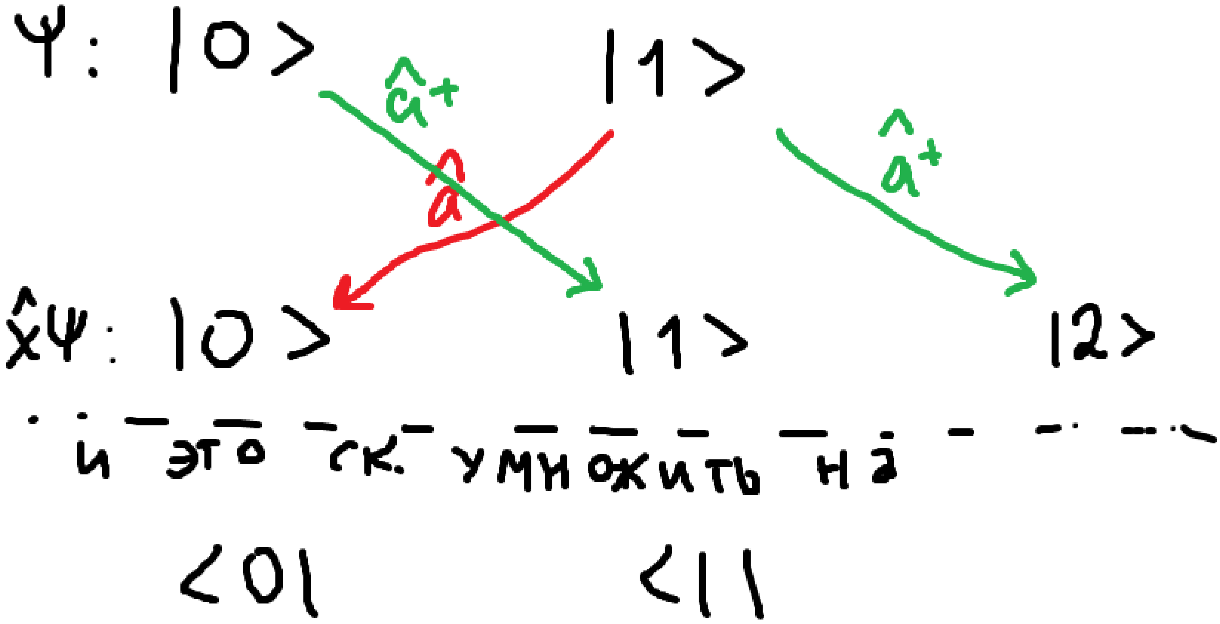
Теперь про энергию. Естественно, она не зависит от времени (ЗСЭ!) С вероятностью ½ мы получим энергию hω/2, с вероятностью ½ - 3/2 hω/2. В среднем – ½* hω/2+1/2* 3hω/2= hω.

Считаем дисперсию энергии. С вероятностью ½ мы промахнёмся на hω/2 меньше (среднее hω, а мы намеряем hω/2). С вероятностью ½ мы промахнёмся на hω/2 больше (среднее hω, а мы намеряем 3hω/2). Дисперсия – это матожидание квадрата погрешности, т.е. $½ * (h\omega/2)^2+½ * (h\omega/2)^2=(h\omega/2)^2$.

Чтобы найти <x>, надо подсчитать $<\Psi(t)|\hat{x}|\Psi(t)>$. Как вы уже поняли, и оператор координаты, и оператор импульса надо представлять через операторы рождения и уничтожения, как это было в задаче 1:

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

И вот этот вид надо подставить в $\langle\Psi(t)|\hat{x}|\Psi(t)\rangle$, подставить вид ВФ как $\frac{1}{\sqrt{2}} * \exp\left(-\frac{\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}{2}\right)|0> + \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(-\frac{3\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}{2}\right)|1>$ и раскрыть всевозможные скобки. Получится дофига слагаемых, но часть занулится. Давайте начертим вот такую схему без учёта коэфов:



Видно, что будет два ненулевых слагаемых, а слагаемое с |2>, скалярно домножившись на <Ψ|, уйдёт.
Теперь считаем с коэфами:

$\hat{x}\Psi(t) = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(-\frac{3\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}{2}\right)\sqrt{1}|0> + \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(-\frac{\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}{2}\right)\sqrt{1}\,|1>) =$
$\frac{x_0}{2}(\exp\left(-\frac{3\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}{2}\right)\sqrt{1}|0> + \exp\left(-\frac{\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}{2}\right)\sqrt{1}\,|1>)$

И домножаем на бра $\frac{1}{\sqrt{2}} * \exp\left(-\frac{\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}{2}\right)|0> + \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(-\frac{3\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}{2}\right)|1>$:

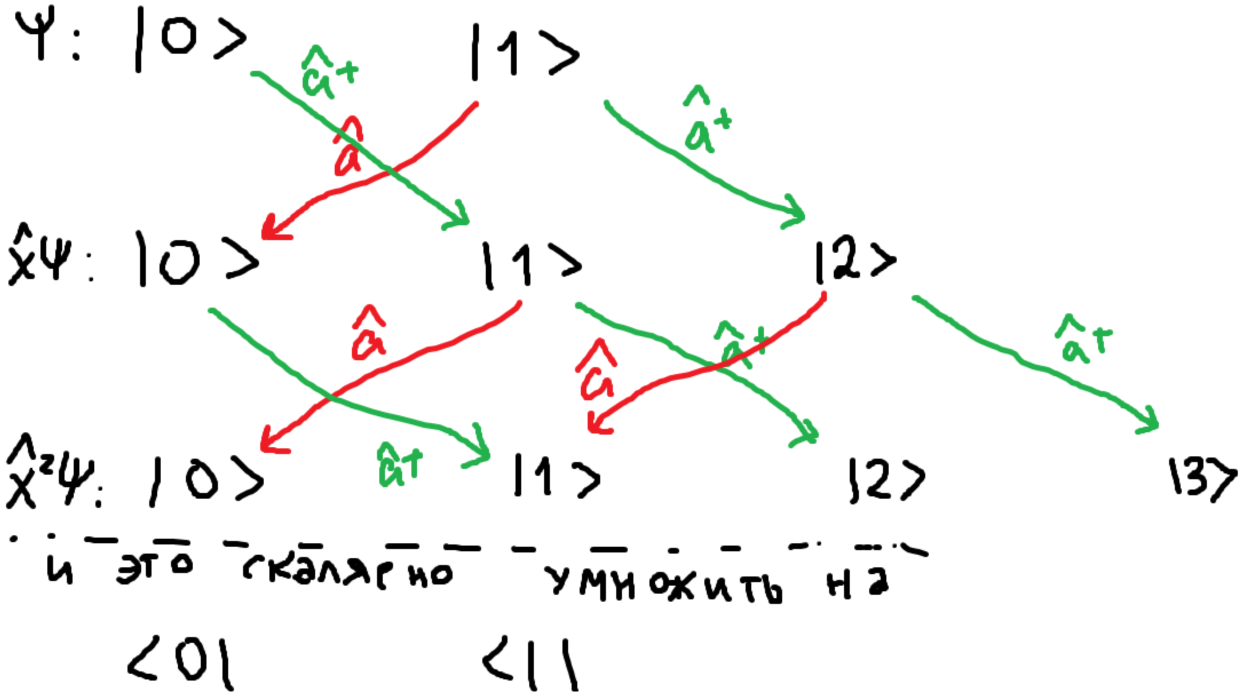
$$< x > (t) = \frac{x_0}{2}\left(\exp\left(+\frac{\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}{2}\right)\exp\left(-\frac{3\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}{2}\right) + \exp\left(\frac{3\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}{2}\right)\left(-\frac{\mathrm{i}\omega\mathrm{t}}{2}\right)\right) = \frac{x_0}{2}\cos\omega t$$

Вот и ответ.

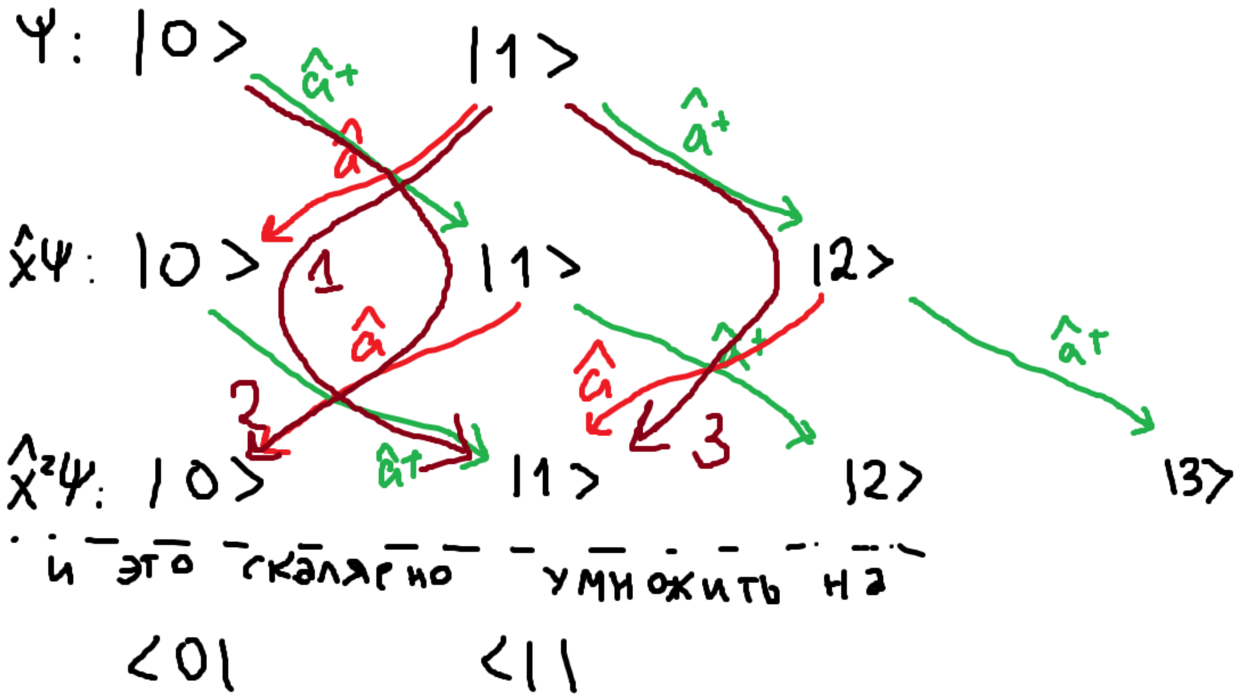
Теперь считаем дисперсию. Надо уже считать уже средний квадрат координаты:

$\langle x^2\rangle = \langle\Psi(t)|\hat{x}^2|\Psi(t)\rangle$

Рисуем схемку:



|2> и |3> дадут 0, так что будет три ненулевых слагаемых для каждой из трёх траекторий:



Берём исходную ВФ

$\frac{1}{\sqrt{2}} * \exp\left(-\frac{i\omega t}{2}\right) |0> + \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-\frac{3i\omega t}{2}\right) |1>$

и ведём её по трём траекториям, домножая на коэф-ты $\sqrt{n}$ и $\sqrt{n+1}$ из

$$\hat{a}|n> = \sqrt{n}|n-1>$$

$$\widehat{a^{+}}|n> = \sqrt{n+1}|n+1>$$

Получаем:

$$\widehat{x^2}\Psi = \frac{x_0^2}{2}\Big(\frac{1}{\sqrt{2}} * \sqrt{1} * \sqrt{1} * \exp\left(-\frac{\mathrm{i\omega t}}{2}\right)|0 > + \frac{1}{\sqrt{2}} * (\sqrt{1} * \sqrt{1} + \sqrt{2} * \sqrt{2})\exp\left(-\frac{3\mathrm{i\omega t}}{2}\right)|1 >\Big)$$

Упростим:

$$\widehat{x^2}\Psi = \frac{x_0^2}{2}\Big(\frac{1}{\sqrt{2}} * \exp\left(-\frac{\mathrm{i\omega t}}{2}\right)|0 > + \frac{3}{\sqrt{2}} * \exp\left(-\frac{3\mathrm{i\omega t}}{2}\right)|1 >\Big)$$

Скалярно домножая на бра $\frac{1}{\sqrt{2}} * \exp\left(+\frac{\mathrm{i\omega t}}{2}\right)|0 > + \frac{1}{\sqrt{2}}\exp\left(+\frac{3\mathrm{i\omega t}}{2}\right)|1 >$, получаем

$$< x > (t) = \frac{x_0^2}{2}\left(\frac{1}{2} + \frac{3}{2}\right) = x_0^2$$

Для импульсов Парфёнов предлагает воспользоваться соотношением

$$< p > (t) = m\frac{d < x > (t)}{dt} = m\frac{d\left(\frac{x_0}{2}\cos\omega t\right)}{dt} = -\sqrt{\frac{\hbar\mathrm{m\omega}}{2}}sin\omega t$$

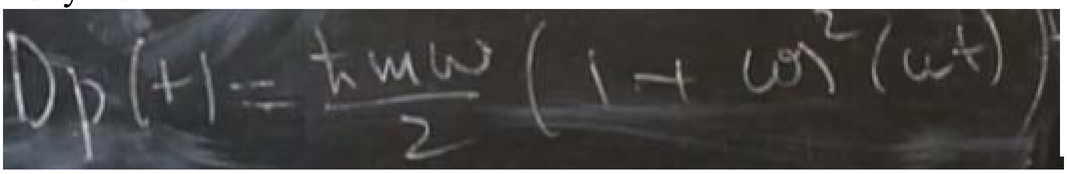
То есть тупо продифференцировать абсциссу и домножить на массу. (Аналог p=mv, Рубцов на ВВКФ доказывал, что так делать можно).

Теперь про дисперсию импульса.

$$< p^2 > (t) = 2m < W_{\text{кин}} > (t) = m < E > = \hbar\mathrm{m\omega}$$

А $Disp\ p =< p^2 > (t) - < p > (t)^2$

Получаем



Это всё были хитрые трюки из разряда «нетрудно, заметить что».

Конечно, вы можете решать задачу без неочевидных хитрых трюков, считая импульс так же, как абсциссу, только у вас там будут минусы и мнимые единицы вылезать, т.к. $\hat{p} = \frac{ip_0}{\sqrt{2}}(\widehat{a^+} - \hat{a})$.