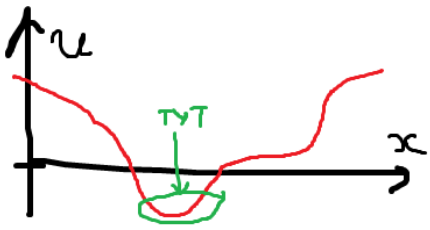
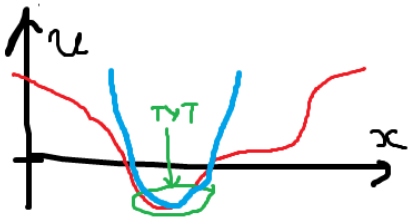
Наверное, король всех потенциалов – параболический: $U = \frac{kx^2}{2}$

Почему он так важен в физике? Потому что нас зачастую интересует поведение частицы в минимуме



А любой минимум можно аппроксимировать параболой:



Так что задача о гармоническом осцилляторе имеет большое практическое значение. Мы ещё рассмотрим на сей счёт одну задачу в конце методички, а пока займёмся непосредственно решением стационарного Шрёдингера.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2 \quad (1)$$

Т.е. потенциал пропорционален квадрату отклонения (ср. $W_п = \frac{kx^2}{2}$).

Нам будет удобно обезразмерить все величины.

Пусть $\hat{x} := \frac{\hat{X}}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}$, $\hat{p} := \sqrt{\hbar\omega m}\,\hat{p}$, $\hat{H} := \frac{\hat{H}}{\hbar\omega}$

Тогда подстановкой (1) перепишется как

$$\hat{H}^2 = \frac{\hat{p}^2}{2} + \frac{\hat{x}^2}{2} \quad (2)$$

Введём два новых оператора:

Оператор рождения $\hat{a} \overset{def}{=} \frac{\hat{x} + i\hat{p}}{\sqrt{2}}$, $\hat{a} \overset{def}{=} \frac{\hat{x} - i\hat{p}}{\sqrt{2}}$

Лемма. $[a, a^+] = 1$. Д-во: вычислим:

$[a, a^+] = \frac{1}{2}[\hat{x} + i\hat{p}, \hat{x} - i\hat{p}] = \frac{1}{2}([\hat{x}, \hat{x}] + i[\hat{p}, \hat{x}] - i[\hat{x}, \hat{p}] - [\hat{p}, \hat{p}]) = \frac{1}{2} \cdot 2i[\hat{p}, \hat{x}]$. Но $[\hat{x}, \hat{p}] = i$ для безразмерных x и p (в чём можно убедиться:

$\hat{x}_{ср} = c\frac{\hat{x}_p}{\sqrt{\hbar}}$; $\hat{p}_{ср} = c\sqrt{\hbar}\,\hat{p}_p$. $[\hat{x}_p, \hat{p}_p] = i\hbar \Rightarrow [\hat{x}_{ср}, \hat{p}_{ср}] = \hbar$

(бр - безразмерные, р - размерное).

Тогда $\frac{1}{2}\cdot 2i(-i) = 1$ ч.т.д.

Из определений a^+ и a следует

$\hat{a} + \hat{a}^+ = \sqrt{2}\,\hat{x}$ (3), $\hat{a} - \hat{a}^+ = \sqrt{2}i\,\hat{p}$ (4)

Выразим гамильтониан г/з a и a^+. Для этого подставим $\hat{x}$ и $\hat{p}$ из (3) и (4) в (2):

$$\hat{H}^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{a}-\hat{a}^+}{\sqrt{2}i}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{a}+\hat{a}^+}{\sqrt{2}}\right)^2 =$$

$$= -\frac{1}{4}\left(\hat{a}^2 - \hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^{+2}\right) + \frac{1}{4}\left(\hat{a}^2 + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}^{+2}\right) =$$

напомним, что операторы умножаются почти как многочлены, только умножение некоммутативно, поэтому ф-лы сокр. умножения операторов использовать нельзя:

Пример: $\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right)^2 = \frac{\partial^2 x}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial^2 y}{\partial y^2}$

здесь коммутируют, а в общем случае нет!

$$= +\frac{1}{4}\hat{a}\hat{a}^+ + \frac{1}{4}\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{4}\hat{a}\hat{a}_+ + \frac{1}{4}\hat{a}_+\hat{a} =$$

$$= \frac{\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}}{2} = \frac{2\hat{a}\hat{a}_+ + [\hat{a}^+, \hat{a}]}{2} =$$

$= \hat{a}\hat{a}_+ - 1/2$ (использовали лемму)

$\hat{H} = \hat{a}\hat{a}_+ - 1/2$ (5), учитывая $[\hat{a}, \hat{a}_+] = 1$, $\hat{H} = \hat{a}_+\hat{a} + 1/2$ (5*)

Выясним СВ и СЗ у $\hat{H}$. Вообще трудно решать ур-е Шрёдингера без всяких $\hat{a}^+$ и $\hat{a}$, но это потребует ввода специальных ф-ций. Поэтому используем наш метод с $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$.

Пусть мы нашли СВ H с СЗ ε:

$$\hat{H}|\Psi_\varepsilon\rangle = \varepsilon|\Psi_\varepsilon\rangle$$

А теперь найдём $\hat{H}(\hat{a}^+|\Psi_\varepsilon\rangle)$.

Распишем цепочку равенств:

$$a^+(\varepsilon|\Psi_\varepsilon\rangle) = a^+(\hat{H}|\Psi_\varepsilon\rangle) = a^+(aa^+ - \tfrac{1}{2})|\Psi_\varepsilon\rangle =$$

$$= (a^+aa^+ - \tfrac{1}{2}a^+)|\Psi_\varepsilon\rangle = (a^+a - \tfrac{1}{2})a^+|\Psi_\varepsilon\rangle, \text{ т.е.}$$

$$(a^+a - \tfrac{1}{2})a^+|\Psi_\varepsilon\rangle = a^+\varepsilon|\Psi_\varepsilon\rangle, \text{ также верно (6)}$$

$$a^+|\Psi_\varepsilon\rangle = a^+|\Psi_\varepsilon\rangle \text{ (тривиально)} \quad (7)$$

Сложим (6) и (7); левые и правые части:

$$\underbrace{(\hat{a}^+\hat{a} + \tfrac{1}{2})}_{\hat{H}\text{ (см. 5)}} a^+|\Psi_\varepsilon\rangle = (\varepsilon+1)a^+|\Psi_\varepsilon\rangle,$$

т.е. $\hat{a}^+|\Psi_\varepsilon\rangle$ – СВ $\hat{H}$ с СЗ $\varepsilon+1$.

Аналогично $\hat{a}|\Psi_\varepsilon\rangle$ – СВ $\hat{H}$ с СЗ $\varepsilon-1$.

Предположим, что мы многократно действуем a на СВ $\hat{H}$. Тогда рано или поздно СЗ станет <0, что невозможно из физических соображений (т.к. СЗ – это ε, энергия в $\hbar\omega$).

Значит, $\exists\, \Psi_0$, что Ψ_0 – СВ $\hat{H}$ и

$$\hat{a}|\Psi_0\rangle = 0$$

Тогда $\hat{H}|\Psi_0\rangle = (\hat{a}^+\hat{a} + \tfrac{1}{2})|\Psi_0\rangle = \hat{a}_+\hat{a}|\Psi_0\rangle + \tfrac{1}{2}|\Psi_0\rangle =$

$= \hat{a}_+(0) + \tfrac{1}{2}|\Psi_0\rangle = \tfrac{1}{2}|\Psi_0\rangle$, т.е. СЗ $= 1/2$.

Отсюда $\varepsilon = n + 1/2$, $E_n = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$ –

– известный спектр уровней энергии!

Займёмся поиском $\Psi(x)$, соответствующие различным n.

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{x} + i\hat{p}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{x} + \frac{\partial}{\partial x}\right)$$

Сначала вычислим $\Psi_0(x)$

$$\hat{a}\Psi_0(x) = 0 \Leftrightarrow x\Psi_0(x) + \frac{\partial}{\partial x}\Psi_0(x) = 0$$

$$\Downarrow$$

$$\Psi_0(x) \text{ с учётом нормировки} = \pi^{-1/4} e^{-x^2/2}.$$

Правда, у нас x безразмерное, так что в пересчёте на размерные переменные $\Psi_0(x) = A e^{-x^2/2l^2}$

А как найти $\Psi_n(x)$? Нужно поэкспериментировать и над $\hat{a}^+$, но нужно быть аккуратным, потому что при действии $\hat{a}_+$ на <u>нормированную</u> $|\Psi_n\rangle$ мы можем получить <u>ненормированную</u> $|\Psi_{n+1}\rangle$. В дальнейших выкладках мы будем понимать под $|\Psi_n\rangle$ нормированные волновые ф-ции.

Нам нужно узнать коэф-ты с их:

$\hat{a}^+|\Psi_n\rangle = c(n)|\Psi_{n+1}\rangle$ $\quad c(n)$ и $\tau(n)$ — ф-ции с 1 аргументом — номером уровня энергии

$\hat{a}|\Psi_n\rangle = \tau(n)|\Psi_{n-1}\rangle$,

$\langle\Psi_n|\hat{a}_+\hat{a}|\Psi_n\rangle =$ в линальных обозначениях

$$(\Psi_n^+, \hat{a}_+\hat{a}\Psi_n) \underset{\uparrow}{=} (\hat{a}\Psi_n^+, \hat{a}\Psi_n)$$

т.к. $\hat{a}_+$ и $\hat{a}$ — сопряжённые друг другу операторы

$$= (\tau(n)\Psi_n^+, \tau(n)\Psi_n) = \tau_n^2 \quad (\text{т.к. } \langle\Phi_n^+\Psi_n\rangle = 1).$$

Аналогично $\langle\Psi_n|\hat{a}\hat{a}_+|\Psi_n\rangle = c_n^2$.

С другой стороны, $\langle\psi_n|\hat{a}_+\hat{a}|\psi_n\rangle =$

$= \langle\psi_n|\hat{H} - \frac{1}{2}\cdot|\psi_n\rangle = -\frac{1}{2}\langle\psi_n|\psi_n\rangle + \langle\psi_n|\hat{H}|\psi_n\rangle =$

$= -\frac{1}{2} + n + \frac{1}{2} = n$

$\langle\psi_n|\hat{a}\,\hat{a}_+|\psi_n\rangle$ аналогично $= \frac{1}{2} + n + \frac{1}{2} = n+1$

$\Rightarrow c_n = \sqrt{n+1}$ (9) $\tau_n = \sqrt{n}$ (9),

$$\hat{a}_+|\psi_n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\psi_n\rangle \quad (10)$$
$$\hat{a}|\psi_n\rangle = \sqrt{n}\,|\psi_n\rangle$$

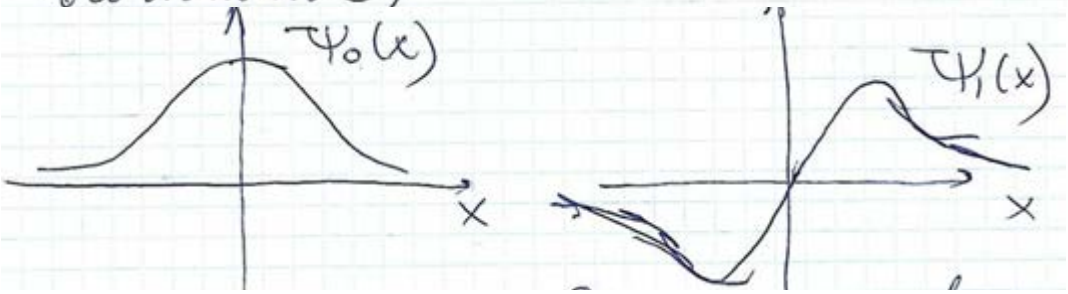
Тогда $|\psi_n\rangle = \frac{\hat{a}^+|\psi_{n-1}\rangle}{\sqrt{n}}$ в рекуррентном виде,

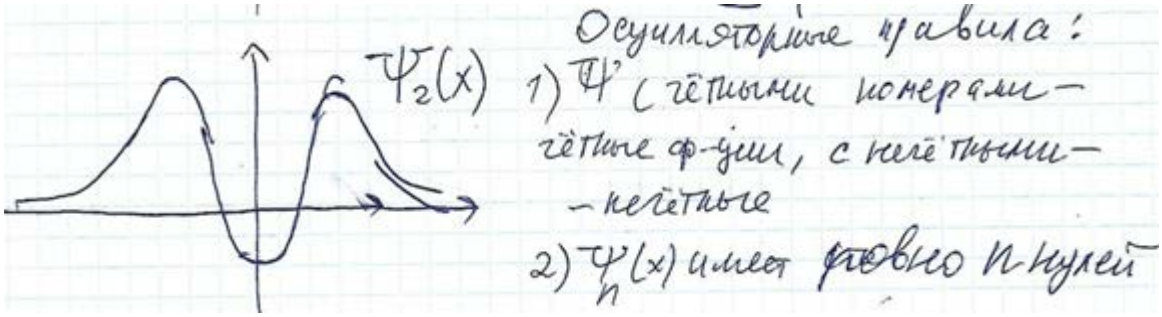
$$|\psi_n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n|\psi_0\rangle}{\sqrt{n!}}.$$

Подставляя $|\psi_0\rangle$ и явный вид $\hat{a}_+$, получаем

$$|\psi_n\rangle = \left(2^n n!\sqrt{\pi}\right)^{-1/2}\left(x - \frac{d}{dx}\right)^n \exp(-x^2/2)$$

Если раскрыть $\left(x - \frac{d}{dx}\right)^n$ и применить его к экспоненте, то получится $\exp(-x^2/2)$ на полином n-й степени. Этот полином наз-ся полином Эрмита, а сама $|\psi_n\rangle(x)$ ф-ция Гаусса-Эрмита (Гаусс - это $\exp(-x^2/2)$), так что всё логично :)



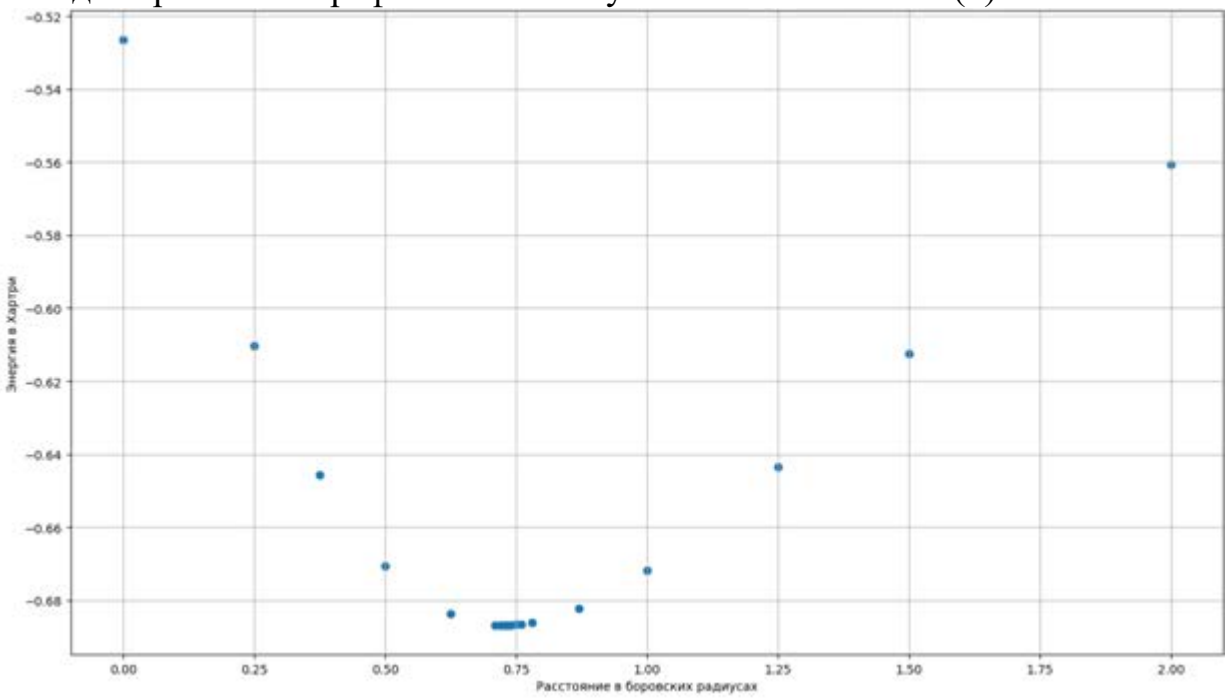


Что из этого нужно запомнить?
1) Уровни энергий осциллятора: $E_n=h\omega(n+1/2)$
2) Приблизительный вид первых трёх волновых функций, то, что с чётным номером n они чётны, а с нечётным нечётны. Если вы на третьем курсе, то вас заставят учить их конкретный вид, с полиномами Эрмита, которыми вы пройдёте на тот момент на ММФ.
3) Вид операторов $\hat{a}^+$ и $\hat{a}^-$ (он же $\hat{a}$), как они выражаются через операторы координаты и импульса, а также то, что они делают с ВФ осциллятора (соответственно, повышают или понижают).

Замечание: мы в выводе эти самые операторы рождения-уничтожения $\hat{a}^+$ и $\hat{a}$ использовали, а можно было бы и без них – как, например, делает Попов в своём учебнике по атомке. Почему я (и мой семинарист по квантам Станислав Сергеевич Страупе) их использует? Ну, во-первых, так красивее, а во-вторых, они пригождаются при решении задач на гармонический осциллятор. См. задачи тут http://anti-moda.ru/kvanteor.html (две методички по квантовой теории).

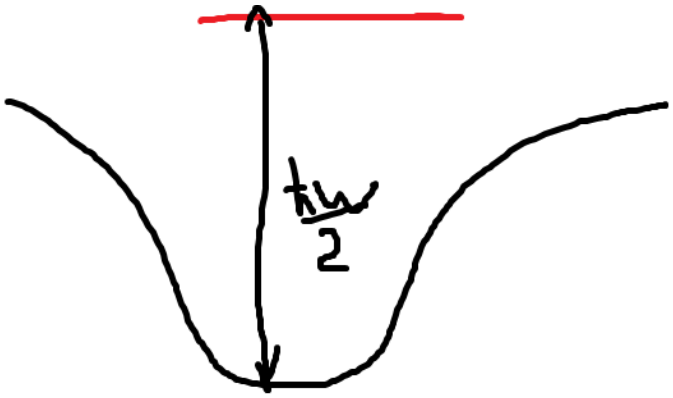
А мы тут разберём задачу немного другого толка на гармонический осциллятор (как раз в духе 4-5 семестра).
Заодно это превосходная задача на атомную систему единиц.

Вы видите реальный график из моей научки – зависимость U(x):



Хартри – атомная единица энергии
боровский радиус – атомная единица расстояния.

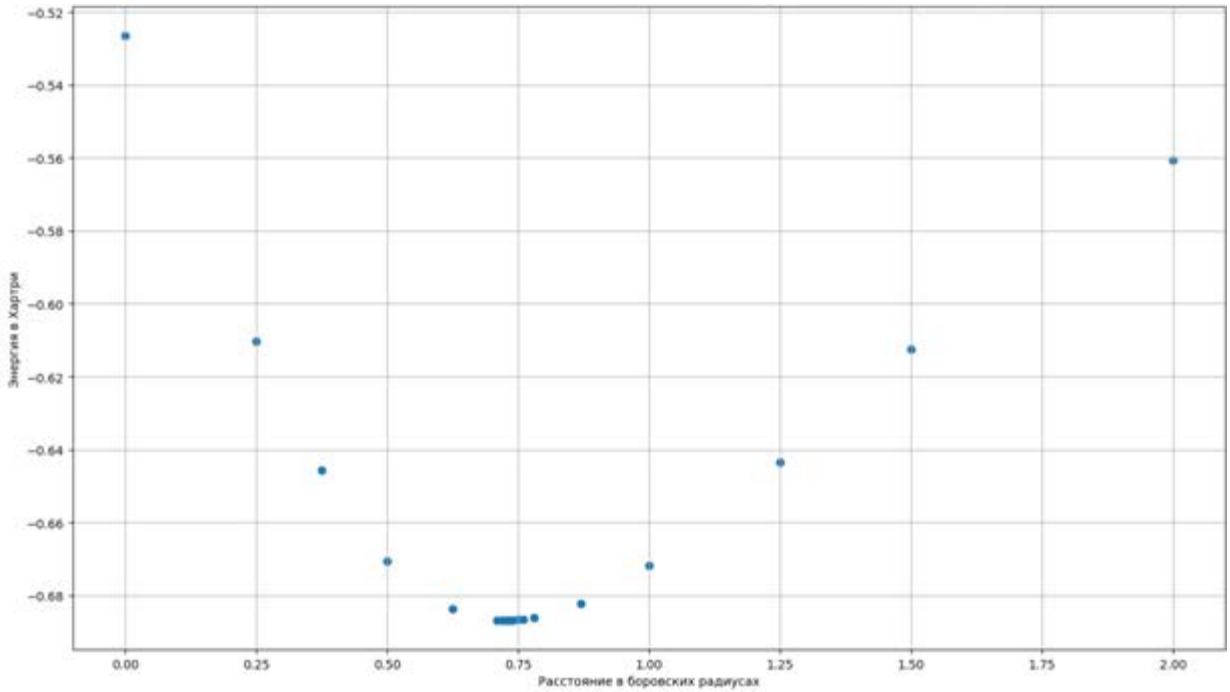
Мы явно видим минимум. Вопрос: влезет ли в него уровень энергии для протона? А для электрона?
Не будет ли ситуации, когда уже основное состояние будет лежать слишком высоко?



Для этого аппроксируем минимум параболой. В этом случае мы можем использовать известный результат для гармонического осциллятора, где нижний уровень имеет энергию $\frac{\hbar\omega}{2}$. Т.к. $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, то энергию можно переписать как $\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}$.

k ищется из графика как вторая производная. Например, как $k = \frac{E_{n+1}+E_{n-1}-2E_n}{\text{шаг}^2}$.
Для графика на рисунке $k = 1{,}77$ ...
Тогда энергия основного состояния будет $\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1.77}{m}}$ (в атомной системе единиц $\hbar = 1$) и мы получаем $\frac{0{,}67}{\sqrt{m}}$.

И вот смотрите, в чём фокус. Масса электрона в атомных системах единиц равна 1. Т.е. получаем, что основное состояние будет находиться на растоянии 0,67 Хартри от дна. Смотрим на график



и видим, что 0,67 тут никак не влезает! Так что электрон не поместится в нашу яму.

А протон?
В атомных единицах m будет отношение масс протона и электрона, т.е. примерно 1800. Получим $\frac{0,67}{\sqrt{1800}}$ – приблизительно 0,01569. Смотрим на график, и поменяем, что протон влезает, причём с большим запасом.

Такова физика! Классические числа бы вообще без проблем легли в яму.
Смотрите, как лежит шар в ладони:

А у квантовых частиц свои приколы. Тут можно вспомнить неопределённость Гейзенберга: за локализованность частицы в пространстве приходится платить размытостью по импульсу (и, как следствие, по энергию). Протон более тяжёлая, классическая, частица и дисперсия энергии у неё меньше и в яму она пролезает. Электрон – увы.

Как тут не вспомнить бессмертный комикс

Вот медвежонок и лошадка – тяжёлые частицы, которые в ямы падают, а ёжик – электрон, который никак не хочет в яму падать. Только в физике ёжик бы не стоял на краю ямы, а плотность его вероятности была бы сильно размазана ☺
Конечно, комикс не мой, а художника Николая Воронцова, взяв отсюда https://vk.com/wall-55277864_6306 , «Кувыркотика», стр. 75. Очень рекомендую, кстати, все три книжки с целью чисто поржать.