Глава 3

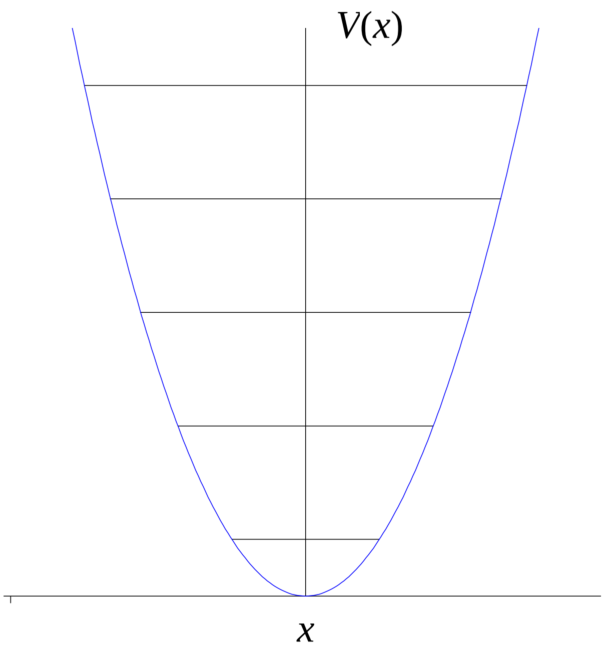
Едномерни стационарни задачи

3.6 Линеен хармоничен осцилатор

Линейният едномерен хармоничен осцилатор се описва със следната потенциалната енергия:

$$\hat{V}(x) = \tfrac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2. \tag{3.1}$$

Разглеждаме положителни енергии, $E > 0$.



Фигура 3.1: Потенциална енергия на линейния хармоничен осцилатор.

Хамилтонианът е сума от кинетична и потенциална енергия:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \tfrac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2. \tag{3.2}$$

Въвеждаме безразмерните оператори

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{H}}{\hbar\omega} = \frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega\hat{x}^2}{2\hbar} = \tfrac{1}{2}\left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2\right), \tag{3.3а}$$

$$\hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}}, \qquad \hat{Q} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}. \tag{3.3б}$$

Използвайки комутационната формула $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, намираме:

$$[\hat{Q}, \hat{P}] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\hat{x}, \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}}\right] = i. \tag{3.4}$$

Въвеждаме нови безрамерни оператори: *оператори на раждане* $\hat{a}$ *и унищожение* $\hat{a}^\dagger$:

$$\hat{a} = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{P}), \qquad \hat{a}^\dagger = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - i\hat{P}). \tag{3.5}$$

Понеже $\hat{Q}$ и $\hat{P}$ са ермитови оператори, лесно се вижда, че $\hat{a}^\dagger$ е ермитово спрегнат на $\hat{a}$:

$$(\hat{a})^\dagger = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{P})^\dagger = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q}^\dagger - i\hat{P}^\dagger) = \tfrac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - i\hat{P}) = \hat{a}^\dagger. \tag{3.6}$$

Да намерим комутатора на $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \tfrac{1}{2}[(\hat{Q} + i\hat{P}), (\hat{Q} - i\hat{P})] = \tfrac{1}{2}[\hat{Q}, -i\hat{P}] + \tfrac{1}{2}[i\hat{P}, \hat{Q}] = \hat{1}. \tag{3.7}$$

Имаме

$$\hat{a}^\dagger\hat{a} = \tfrac{1}{2}(\hat{Q} - i\hat{P})(\hat{Q} + i\hat{P}) = \tfrac{1}{2}(\hat{Q}^2 + \hat{P}^2) + \tfrac{1}{2}i[\hat{Q}, \hat{P}] = \tfrac{1}{2}(\hat{Q}^2 + \hat{P}^2) - \tfrac{1}{2} = \hat{\mathcal{H}} - \tfrac{1}{2}, \tag{3.8}$$

или

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \tfrac{1}{2} = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \tfrac{1}{2} = \hat{N} + \tfrac{1}{2}, \tag{3.9}$$

където сме въвели *оператора на броя на частиците* $\hat{N}$:

$$\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a} = \hat{a}\hat{a}^\dagger - 1. \tag{3.10}$$

Операторът $\hat{N}$ комутира с хамилтониана:

$$[\mathcal{H}, \hat{N}] = 0. \tag{3.11}$$

Имаме следните комутационни съотношения:

$$[\hat{a}, \hat{N}] = \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} = (\hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{a} = [\hat{a}, \hat{a}^\dagger]\hat{a} = \hat{a}, \tag{3.12а}$$

$$[\hat{a}^\dagger, \hat{N}] = \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger(\hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^\dagger) = \hat{a}^\dagger[\hat{a}^\dagger, \hat{a}] = -\hat{a}^\dagger. \tag{3.12б}$$

Нека ν е собствена стойност на оператора $\hat{N}$, а ψ_ν е съответната ѝ собствена функция. Понеже $\hat{N}$ и $\hat{\mathcal{H}}$ комутират, то ψ_ν е собствена функция и на $\hat{\mathcal{H}}$:

$$\hat{N}\psi_\nu = \nu\psi_\nu, \tag{3.13а}$$

$$\hat{\mathcal{H}}\psi_\nu = \left(\hat{N} + \tfrac{1}{2}\right)\psi_\nu = \left(\nu + \tfrac{1}{2}\right)\psi_\nu. \tag{3.13б}$$

Свойство 1. Собствените стойности ν са неотрицателни: $\nu \geqq 0$.

Доказателство. Използвайки дефиницията на $\hat{N}$, уравнението за собствените му стойности, както и факта, че $\hat{a}^\dagger$ е ермитово спрегнат на $\hat{a}$, намираме:

$$(\psi_\nu, \hat{N}\psi_\nu) = \nu(\psi_\nu, \psi_\nu) = \nu, \tag{3.14а}$$
$$(\psi_\nu, \hat{N}\psi_\nu) = (\psi_\nu, \hat{a}^\dagger\hat{a}\psi_\nu) = (\hat{a}\psi_\nu, \hat{a}\psi_\nu) = \|\hat{a}\psi_\nu\|^2 \geqq 0, \tag{3.14б}$$
$$\implies \nu \geqq 0. \tag{3.14в}$$

Свойство 2. $\hat{a}^\dagger$ е оператор на раждане (creation), а $\hat{a}$ е оператор на унищожение (annihilation).

Доказателство. Пресмятаме

$$\hat{N}(\hat{a}^\dagger\psi_\nu) = (\hat{a}^\dagger\hat{N} + \hat{a}^\dagger)\psi_\nu = (\nu+1)(\hat{a}^\dagger\psi_\nu), \tag{3.15а}$$
$$\hat{N}(\hat{a}\psi_\nu) = (\hat{a}\hat{N} - \hat{a})\psi_\nu = (\nu-1)(\hat{a}\psi_\nu). \tag{3.15б}$$

Следователно действието на $\hat{a}^\dagger$ създава собствена функция на $\hat{N}$ със собствена стойност $\nu+1$, а действието на $\hat{a}$ създава собствена функция на $\hat{N}$ със собствена стойност $\nu-1$. Това означава, че можем да напишем

$$\hat{a}^\dagger\psi_\nu = c\psi_{\nu+1}, \qquad \hat{a}\psi_\nu = d\psi_{\nu-1}. \tag{3.16}$$

Константите c и d се определят от условието за нормиране:

$$(\psi_{\nu+1}, \psi_{\nu+1}) = \frac{(\hat{a}^\dagger\psi_\nu, \hat{a}^\dagger\psi_\nu)}{|c|^2} = \frac{(\psi_\nu, \hat{a}\hat{a}^\dagger\psi_\nu)}{|c|^2} = \frac{(\psi_\nu, (\hat{N}+1)\psi_\nu)}{|c|^2} = \frac{\nu+1}{|c|^2}$$
$$\implies \quad |c| = \sqrt{\nu+1}. \tag{3.17}$$

$$(\psi_{\nu-1}, \psi_{\nu-1}) = \frac{(\hat{a}\psi_\nu, \hat{a}\psi_\nu)}{|d|^2} = \frac{(\psi_\nu, \hat{a}^\dagger\hat{a}\psi_\nu)}{|d|^2} = \frac{(\psi_\nu, \hat{N}\psi_\nu)}{|d|^2} = \frac{\nu}{|d|^2}$$
$$\implies \quad |d| = \sqrt{\nu}. \tag{3.18}$$

И така, имаме:

$$\hat{a}^\dagger\psi_\nu = \sqrt{\nu+1}\,\psi_{\nu+1}, \tag{3.19а}$$
$$\hat{a}\psi_\nu = \sqrt{\nu}\,\psi_{\nu-1}. \tag{3.19б}$$

Свойство 3. ν е цяло число.

Доказателство. Нека n е това цяло число, за което ν е в интервала $n \leqq \nu < n+1$. Нека да подействаме точно n пъти с оператора на унищожение $\hat{a}$:

$$\begin{aligned}\hat{a}^n\psi_\nu &= \sqrt{\nu}\,\hat{a}^{n-1}\psi_{\nu-1} = \sqrt{\nu(\nu-1)}\,\hat{a}^{n-2}\psi_{\nu-2} = \cdots \\ &= \sqrt{\nu(\nu-1)\cdots(\nu-n+1)}\,\psi_{\nu-n}.\end{aligned} \tag{3.20}$$

Понеже $\nu \geqq n$, то индексът на $\psi_{\nu-n}$ е неотрицателен. Действаме отново с оператора $\hat{a}$:

$$\hat{a}^{n+1}\psi_\nu = \sqrt{\nu(\nu-1)\cdots(\nu-n+1)(\nu-n)}\,\psi_{\nu-n-1}. \tag{3.21}$$

Индексът на $\psi_{\nu-n-1}$ вече е $\nu-n-1<0$, което означава, че това състояние е невъзможно, понеже съгласно *свойство 1* индексът трябва да е неотрицателен. Това означава, че в последното равенство квадратният корен трябва да е равен на нула, т.е. $\nu = 0, 1, 2, ...$

И така, имаме следните равенства:

$$\hat{a}\psi_0 = 0, \tag{3.22а}$$
$$\hat{a}^\dagger\psi_0 = \psi_1, \tag{3.22б}$$
$$(\hat{a}^\dagger)^2\psi_0 = \hat{a}^\dagger\psi_1 = \sqrt{2}\,\psi_2, \tag{3.22в}$$
$$(\hat{a}^\dagger)^3\psi_0 = \sqrt{2}\,\hat{a}^\dagger\psi_2 = \sqrt{2.3}\,\psi_3, \tag{3.22г}$$
$$\dots$$
$$(\hat{a}^\dagger)^n\psi_0 = \sqrt{n!}\,\psi_n, \tag{3.22д}$$

Следователно можем да напишем:

$$\psi_n = \frac{(\hat{a}^\dagger)^n\psi_0}{\sqrt{n!}}. \tag{3.23}$$

Свойство 4. (не се изисква за изпита) Така конструираните състояния ψ_n са ортонормирани, т.е.

$$\langle\psi_n \mid \psi_k\rangle = \delta_{nk}. \tag{3.24}$$

Доказателство. От формула (3.23) имаме:

$$\langle\psi_n \mid \psi_k\rangle = \frac{\langle(\hat{a}^\dagger)^n\psi_0 \mid \psi_k\rangle}{\sqrt{n!}} = \frac{\langle\psi_0 \mid \hat{a}^n\psi_k\rangle}{\sqrt{n!}} \tag{3.25}$$

Нека предположим най-напред, че $n = k$; имаме

$$\hat{a}^n\psi_n = \sqrt{n!}\,\psi_0 \tag{3.26}$$

и следователно

$$\langle\psi_n \mid \psi_n\rangle = \frac{\sqrt{n!}\,\langle\psi_0 \mid \psi_0\rangle}{\sqrt{n!}} = 1. \tag{3.27}$$

Нека сега $n > k$. В този случай получаваме

$$\hat{a}^n\psi_k = \hat{a}^{n-k}\sqrt{k!}\,\psi_0 = \sqrt{k!}\,\hat{a}^{n-k}\psi_0 = 0, \tag{3.28}$$

понеже още първият от оставащите $n-k$ оператори на унищожение, приложен върху ψ_0, ще даде нула. Ако пък $n > k$, то използваме последната формула, както и свойството на скаларното произведение $\langle a \mid b\rangle = \langle b \mid a\rangle^*$, и получаваме

$$\langle\psi_n \mid \psi_k\rangle = \langle\psi_k \mid \psi_n\rangle^* = 0, \tag{3.29}$$

с което *свойство 4* е доказано.

Нека сега да намерим възможните енергии на осцилатора. От формулата $\hat{\mathcal{H}}\psi_n = (\hat{N} + \frac{1}{2})$ и уравнението за собствените стойности на $\hat{N}$ получаваме

$$\hat{N}\psi_n = n\psi_n \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{\mathcal{H}}\psi_n = \left(\hat{N} + \tfrac{1}{2}\right)\psi_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\psi_n, \tag{3.30а}$$

$$\hat{H}\psi_n = \hbar\omega\mathcal{H}\psi_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega\psi_n, \tag{3.30б}$$

Така получаваме, че енергията се квантува:

$$E_n = \left(n + \tfrac{1}{2}\right) \hbar\omega \qquad (n = 0, 1, 2, \dots), \tag{3.31}$$

с което получаваме идентичен резултат, както и при стандартния подход с решаването на стационарното уравнение на Шрьодингер в предишната тема. Енергиите са еквидистантни, разделени с $\hbar\omega$, като енергията на основното (вакуумно) състояние е $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega > 0$. Първите няколко енергии са:

$$E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega, \quad E_1 = \tfrac{3}{2}\hbar\omega, \quad E_2 = \tfrac{5}{2}\hbar\omega, \quad E_3 = \tfrac{7}{2}\hbar\omega, \quad \dots \tag{3.32}$$

В заключение отбелязваме, че изложеният тук подход за решаване на задачата за хармоничния осцилатор позволява да се намерят по много лесен начин и собствените вълнови функции на хамилтониана, ако знаем тази на вакуумното състояние ψ_0. В предишната тема намерихме, че

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{\frac{1}{2}} b}} e^{-\frac{1}{2}(x/b)^2}, \tag{3.33а}$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} b}} \frac{2x}{b} e^{-\frac{1}{2}(x/b)^2}, \tag{3.33б}$$

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} b}} \left(\frac{2x^2}{b^2} - 1\right) e^{-\frac{1}{2}(x/b)^2}, \tag{3.33в}$$

$$\psi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{3\pi^{\frac{1}{2}} b}} \left(\frac{2x^3}{b^3} - \frac{3x}{b}\right) e^{-\frac{1}{2}(x/b)^2}, \tag{3.33г}$$

$$\dots$$

Имаме

$$\psi_1 = \hat{a}^\dagger \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} b}} (\hat{Q} - i\hat{P}) e^{-\frac{1}{2}(x/b)^2}, \tag{3.34}$$

където $b = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$. Понеже $\hat{Q} = \hat{x}/b$ и $\hat{P} = b\hat{p}/\hbar = -ib\, d/dx$, получаваме

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} b}} \left(\frac{x}{b} - b\frac{d}{dx}\right) e^{-\frac{1}{2}(x/b)^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} b}} \frac{2x}{b} e^{-\frac{1}{2}(x/b)^2}, \tag{3.35}$$

което е точно формула (3.33а).

По същата рецепта може да се получи вълновата функция на което и да е друго собствено състояние на хармоничния осцилатор.