## 2.2. Линейный гармонический осциллятор

Рассмотрим одномерную потенциальную яму

$$\boxed{V(x) = \frac{1}{2}\, m\omega^2 x^2} \qquad (2.4)$$

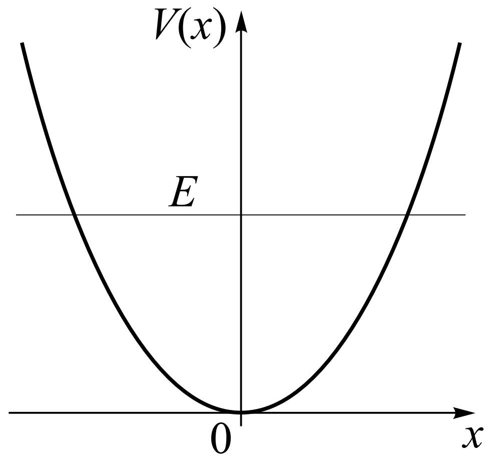


Рис. 2.1.

с параметром [1] $\omega$ (рис. 2.1). Такой потенциал называется *осцилляторным*. Примерами классических осцилляторов являются пружинный, математический и физический маятники, совершающие малые колебания. Движение частиц в таком потенциале всегда *финитное*. В классической механике частица с массой $m$ в поле (2.4) совершает *гармонические колебания*:

$$x(t) = A\cos(\omega t + \alpha),$$

где $\omega$ — циклическая частота, $A$ — амплитуда, $\alpha$ — начальная фаза. В квантовой механике линейными гармоническими осцилляторами моделируются колебания ионов в узлах кристаллической решетки, а также колебательные степени свободы в многоатомных молекулах при достаточно малых амплитудах колебаний (т. е. когда межатомный потенциал можно считать квадратичным). Отметим важность модели одномерного линейного гармонического осциллятора для построения формализма вторичного квантования и квантовой теории поля.

Гамильтониан одномерного квантового осциллятора с потенциалом (2.4)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}\, m\omega^2 x^2$$

инвариантен относительно отражения $x \to -x$, поэтому, помимо полной энергии, интегралом состояния будет также и четность. Для нахождения дискретных значений энергии $E \geqslant 0$ и волновых функций стационарных состояний осциллятора необходимо решить стационарное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\,\Psi(x) + \frac{1}{2}\, m\omega^2 x^2 \Psi(x) = E\Psi(x) \qquad (2.5)$$

с граничными условиями

$$\Psi(\pm\infty) = 0 \qquad (2.6)$$

вследствие финитного характера движения.

[1] Точнее, параметром является коэффициент упругости $k$: $V(x) = \frac{1}{2}\, kx^2$; циклическая частота $\omega = \sqrt{k/m}$, где $m$ — масса частицы, вводится для удобства.

Прежде всего перейдем в (2.5) к безразмерной координате $\xi = x/x_0$ (константа $x_0$ с размерностью длины будет определена ниже; это «естественная» единица длины для осциллятора, позволяющая существенно упростить все математические выкладки):

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\xi^2} - \underbrace{\left(\frac{m\omega x_0^2}{\hbar}\right)^2}_{1} \xi^2\Phi(\xi) + \frac{2mx_0^2}{\hbar^2}\, E\Phi(\xi) = 0,$$

где $\Phi(\xi) = \Psi(x)$. Константу $x_0$ определим, потребовав обращения в единицу безразмерного множителя перед $\xi^2$. Постоянный коэффициент перед $\Phi(\xi)$ тоже будет безразмерен. Обозначим его $\lambda$. Таким образом, в безразмерных переменных

$$\Phi(\xi) = \Psi(x); \quad \xi = \frac{x}{x_0}; \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}; \quad \lambda = \frac{2mx_0^2}{\hbar^2}\, E = \frac{2E}{\hbar\omega} \tag{2.7}$$

краевая задача (2.5), (2.6) принимает вид:

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\,\Phi(\xi) = 0, \tag{2.8}$$

$$\Phi(\pm\infty) = 0. \tag{2.9}$$

Неизвестными в ней являются $\lambda$ и $\Phi(\xi)$, связанные с исходными неизвестными $E$ и $\Psi(x)$ соотношениями (2.7). Решение задачи всегда будет удовлетворять стандартному условию непрерывности вследствие непрерывности коэффициентов уравнения (2.8).

Решение будем искать с помощью разложения $\Phi(\xi)$ в ряд по степеням $\xi$. Для этого вначале найдем асимптотический вид $\Phi(\xi)$ в окрестностях особых точек уравнения (2.8). Таковыми являются $\xi = \pm\infty$, при которых коэффициент при $\Phi(\xi)$ обращается в бесконечность.

При заданном $\lambda$ безразмерную координату $\xi$ всегда можно выбрать настолько большой, что

$$|\xi| \gg \max(\sqrt{\lambda}, 1), \tag{2.10}$$

и вместо *точного уравнения* (2.8) решать *приближенное*:

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\xi^2} - \xi^2\Phi(\xi) = 0. \tag{2.11}$$

Приближенное решение (2.11) при условии (2.10) имеет вид:

$$\Phi(\xi) \sim \mathrm{e}^{\mp\xi^2/2}. \tag{2.12}$$

Вследствие *граничного условия* (2.9) из (2.12) необходимо выбрать только *затухающее* решение, т. е. искать $\Phi(\xi)$ в виде:

$$\Phi(\xi) = \underbrace{v(\xi)}_{?}\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \tag{2.13}$$

с неизвестной функцией $v(\xi)$. Подстановка (2.13) в (2.8) приводит к следующему уравнению для $v(\xi)$, уже *не содержащему особых точек* (коэффициент при $v(\xi)$ конечен):

$$v''(\xi) - 2\xi v'(\xi) + (\lambda - 1)v(\xi) = 0. \tag{2.14}$$

Граничные условия для $v(\xi)$ формулируются, исходя из (2.9) и (2.13):

$$v(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2}\Big|_{\xi\to\pm\infty} = 0. \tag{2.15}$$

Представим неизвестную функцию $v(\xi)$ в виде ряда Тейлора по степеням $\xi$ с неизвестными коэффициентами:

$$v(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} \underbrace{a_k}_{?}\,\xi^k. \tag{2.16}$$

После подстановки (2.16) уравнение (2.14) принимает вид:

$$\sum_{k=0}^{\infty} \left\{(k+2)(k+1)a_{k+2} - [2k - (\lambda - 1)]a_k\right\}\xi^k = 0. \tag{2.17}$$

При приведении подобных слагаемых (с одинаковой степенью $\xi$) в первой сумме левой части (2.17) мы сделали замену индекса суммирования $k \to k+2$.

Уравнение (2.17) эквивалентно уравнению (2.14). Чтобы (2.17) выполнялось *тождественно при любых значениях* $\xi$, коэффициенты при *всех* степенях $\xi$ должны обратиться в нуль, откуда получаем следующее рекуррентное соотношение для коэффициентов $a_k$:

$$a_{k+2} = \frac{2k - (\lambda - 1)}{(k+2)(k+1)}\,a_k. \tag{2.18}$$

Исследуем ряд (2.13) при условии (2.10). Рассмотрим его далекие слагаемые ($k \gg 1$). На основании (2.18) имеем:

$$\left.\frac{a_{k+2}}{a_k}\right|_{k\gg 1} \simeq \frac{2}{k}.$$

Но такому же соотношению удовлетворяют коэффициенты разложения функции $e^{\xi^2}$:

$$e^{\xi^2} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\xi^{2m}}{m!} = \sum_{k=0,2,\ldots} \underbrace{\frac{1}{(k/2)!}}_{a_k} \xi^k.$$

Действительно,

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = \frac{[k/2]!}{[(k+2)/2]!} = \frac{[k/2]!}{[1+k/2]!} = \frac{2}{k+2} \overset{k\gg 1}{\simeq} \frac{2}{k}.$$

Итак, ряд (2.16) для $v(\xi)$ имеет асимптотику $e^{\xi^2}$ и функция $\Phi(\xi)$ в (2.13) *не удовлетворяет* граничному условию (2.15), а именно, она *растет на бесконечности* как $e^{\xi^2/2}$, что противоречит стандартному условию конечности. Тем не менее, все же можно обеспечить выполнение условия (2.15), поскольку рекуррентное соотношение (2.18) содержит пока произвольный параметр $\lambda$. Его можно подобрать так, чтобы ряд (2.16) *содержал конечное число слагаемых*, т. е. стал полиномом. Действительно, выбрав $\lambda$ *положительным нечетным*

$$\lambda = \lambda_n = 2n+1, \qquad n = 0, 1, \ldots, \tag{2.19}$$

в соответствии с (2.18) получим:

$$a_{n+2} = \frac{2n - [(2n+1)-1]}{(n+1)(n+2)} a_n = 0 = a_{n+4} = a_{n+6} = \ldots \quad \text{при } a_n \neq 0.$$

При этом условии ряд (2.16), превратившись в полином конечной степени $n$, обеспечит выполнение условия (2.15).

Выясним смысл найденных значений $\lambda$. Этот безразмерный параметр связан с энергией соотношением (2.7), поэтому с помощью (2.19) находим значения энергий стационарных состояний осциллятора:

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, \ldots} \tag{2.20}$$

Таким образом, энергия осциллятора *квантуется* вследствие финитного характера движения. Число энергетических уровней бесконечно. Уровни расположены *эквидистантно* на расстоянии $\hbar\omega$ друг от друга (рис. 2.2а).

Ненормированные волновые функции стационарных состояний (точнее — их множители $v(\xi)$) можно получить по рекуррентной формуле (2.18). Положив $a_0 = 1$, $a_1 = 0$, мы получаем коэффициенты всех *четных* полиномов; положив $a_0 = 0$, $a_1 = 1$, мы получаем все *нечетные*

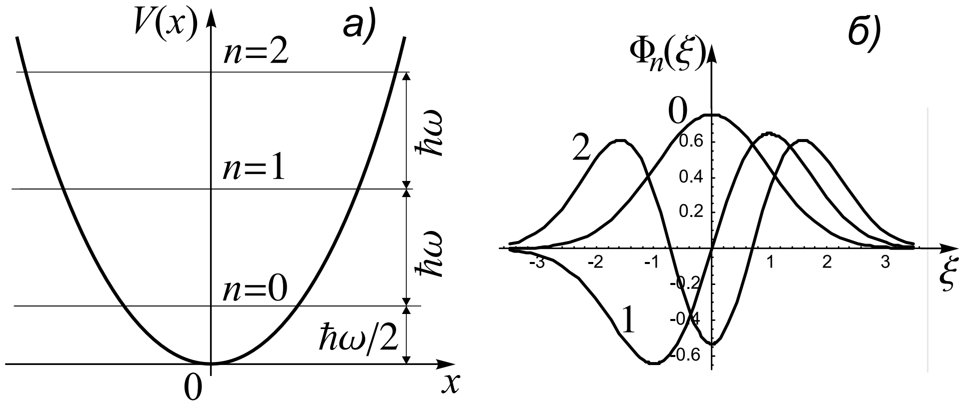


Рис. 2.2.

полиномы. Таким образом, *четность* стационарных состояний определяется энергией (или, что то же самое, значением *квантового числа осциллятора* $n$):

$$\boxed{\Psi_n(-x) = (-1)^n \Psi_n(x), \quad \text{т. е. } P_n = (-1)^n.} \tag{2.21}$$

Полагая $a_1 = 0$ (в первом случае) и $a_0 = 0$ (во втором случае), мы обеспечиваем требование сохранения четности.

Для нахождения явного вида волновых функций учтем, что при условии (2.19) уравнение (2.14) является уравнением для полиномов Чебышева – Эрмита (см. приложение В). Приведем здесь окончательный вид нормированных волновых функций стационарных состояний осциллятора:

$$\boxed{\Psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_0 \sqrt{\pi}}}\, H_n(x/x_0)\, \mathrm{e}^{-x^2/(2x_0^2)}.} \tag{2.22}$$

Вычисление нормировочного множителя можно найти, например, в [1] из списка дополнительной литературы.

Нетрудно убедиться, что для энергий стационарных состояний осциллятора (2.20) и соответствующих им волновых функций (2.22) выполняются все свойства одномерного финитного движения. Графики некоторых волновых функций $\Psi_n(x)$ представлены на рис. 2.2б (цифры у кривых показывают значения $n$).

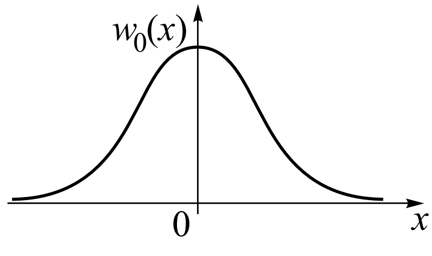


Рис. 2.3.

*Основное состояние осциллятора имеет ненулевую энергию* $E_0 = \hbar\omega/2$ (которая отсчитывается от «дна» потенциальной ямы). Это так называемая *энергия нулевых колебаний*. Наличие нулевых колебаний не противоречит *принципу неопределенностей*, не позволяющему частице опуститься на «дно». Существование таких колебаний экспериментально подтверждается, например, при исследовании рассеяния электронов на ионах кристаллической решетки при температурах вблизи абсолютного нуля. Основному состоянию соответствует волновая функция

$$\boxed{\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}\,\exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right).}$$

Поскольку при удалении от положения равновесия потенциальная энергия монотонно возрастает непрерывным образом, волновые функции будут ненулевыми и в классически недоступной области, хотя они и быстро (экспоненциальным образом) затухают с увеличением $|x|$. График плотности вероятности в основном состоянии дается в качестве примера на рис. 2.3. Он представляет собой гауссову кривую.