```
> restart;
```

```
=========================================================================
|                 РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ                   |
|             (В.М.ГАЛИЦКИЙ, Б.М.КОРНАКОВ, В.И.КОГАН.                   |
|                    ЗАДАЧИ ПО КВАНТОВОЙ МЕХНИКЕ                        |
|                           Журавлев В.М.                              |
|            Ульяновский государственный университет, 2020             |
=========================================================================
```

КВАНТОВЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

```
> with(plots):
  with(plottools):
```

Формат графиков

```
> frm:=axes=boxed,gridlines=true,labeldirections=[horizontal,vertical],labelfont=[TIMES,BOLD,16],titlefont=[TIMES,BOLD,20],font=[TIMES,BOLD,20],symbol=solidcircle,symbolsize=18,legendstyle=[font=["TIMES",BOLD,18],location=bottom],size=[900,600];
```

frm := *axes* = *boxed*, *gridlines* = *true*, *labeldirections* = [*horizontal*, *vertical*], *labelfont* = [*TIMES*, *BOLD*, 16], *titlefont* = [*TIMES*, *BOLD*, 20], *font* = [*TIMES*, *BOLD*, 20], *symbol* = *solidcircle*, *symbolsize* = 18, *legendstyle* = [*font* = ["TIMES", *BOLD*, 18], *location* = *bottom*], *size* = [900, 600] **(1)**

Уравнение Шредингера для гармонического осциллятора

1. В одномерном случае оператор Гамильтона (оператор полной энергии) $\hat{H}$ квантового гармонического осциллятора имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + m\frac{\omega^2}{2}x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + m\frac{\omega^2}{2}x^2$$

Здесь $U(x) = m\frac{\omega^2}{2}x^2$ - потенциальная энергия осциллятора.

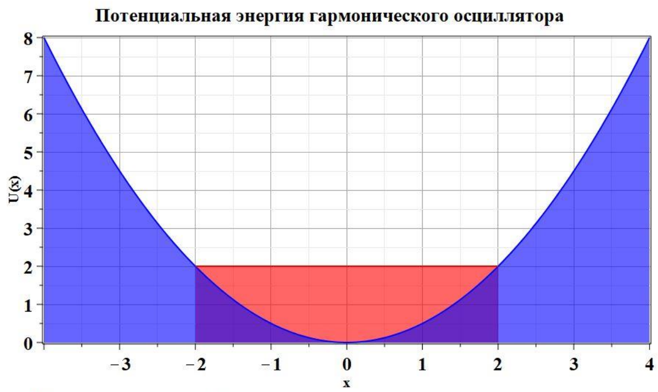
Функция потенциальной энергии

```
> U1:=(x,m,omega)->m*omega^2*x^2/2;
```

$$U1 := (x, m, \omega) \rightarrow \frac{1}{2} m\,\omega^2 x^2 \qquad \textbf{(2)}$$

```
> picU1:=plot(U1(x,1,1),x=-4..4,frm,color=blue,filled=true,thickness=2,title="Потенциальная энергия гармонического осциллятора",labels=["x","U(x)"]):
  picE1:=plot(2,x=-2..2,frm,color="red",filled=true,thickness=2,title="Потенциальная энергия гармонического осциллятора",labels=["x","U(x)"],caption="Красным выделена область, где возможно движение классического гармонического осциллятора"):
```

```
> display(picU1,picE1);
```



Красным выделена область, где возможно движение классического гармонического осциллятора

2. Стационарное уравнение Шредингера для одномерного квантового гармонического осциллятора имеет такой вид:

$$\hat{H}\,\psi(x;E) = \left(\frac{1}{2m}(\hat{p})^2 + \frac{m\cdot\omega^2 x^2}{2}\right)\psi(x;E) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m\cdot\omega^2 x^2}{2}\right)\psi(x;E) = E\psi(x;E)$$

Решением уравнения являются волновые функции состояний с фиксированной энергией, т.е. такие состояния, в которых измерение энергии всегда будет давать значение энергии, равное E.

3. Граничные условия для волновых функций в яме имеют такой вид :

Потенциальная энергия гармонического осциллятора растет неограниченно при $x \to \pm\infty$.

Поэтому при всех энергиях движение будет финитным. Следовательно, при все E волновая функция $\psi(x; E)$ *в пределе* $x \to \pm\infty$ *стремится к нулю :*

$$\lim_{x \to \pm\infty} \psi(x; E) = 0.$$

Поскольку потенциальная энергия является непрерывной при всех x, то двух граничных условий достаточно.

4. Построение решений для гармонического осциллятора. Повышающий и понижающий операторы

Полезно уравнение Шредингера для гармонического осциллятора привести к безразмерному виду.

Для этого введем новую переменную :

$$z = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x$$

В *новых переменных уравнение можно записать так :*

$$-\frac{d^2\psi}{dz^2} + z^2\psi = \varepsilon\psi, \quad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}.$$

Число ε *– безразмерная энергия осциллятора. Введем два неэрмитовых оператора* $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ в *соответствии* с *формулами :*

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z + \frac{d}{dz}\right), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z - \frac{d}{dz}\right)$$

Нетрудно проверить (проверьте самостоятельно), что операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$ *неэрмитовы, но эрмитово сопряжены друг другу :* $\hat{a} = (\hat{a}^+)^+$.

Вычислим их совместное действие на волновые функции. Имеем :

$$\hat{a}^+\hat{a}\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{dz} + z\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dz} + z\right)\psi\right) = \frac{1}{2}\left(-\frac{d^2\psi}{dz^2} + z^2\psi - \psi\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{H}_0 - 1\right)\psi$$

$$\hat{a}\hat{a}^+\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dz} + z\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{dz} + z\right)\psi\right) = \frac{1}{2}\left(-\frac{d^2\psi}{dz^2} + z^2\psi + \psi\right) = \frac{1}{2}\left(\hat{H}_0 + 1\right)\psi.$$

Здесь

$$\hat{H}_0 = -\frac{d^2}{dz^2} + z^2,$$

Обезразмеренный оператор Гамильтона. В *результате для* $\hat{H}_0$ *имеем два возможные представления :*

$$\hat{H}_0 = 2\hat{a}^+\hat{a} + 1,$$
$$\hat{H}_0 = 2\hat{a}\hat{a}^+ - 1.$$

Теперь уравнения Шредингера можно записать двумя способами :

$$(2\hat{a}^+\hat{a} + 1)\psi = \varepsilon\psi, \qquad (1)$$
$$(2\hat{a}\hat{a}^+ - 1)\psi = \varepsilon\psi. \qquad (2)$$

Этими соотношениями можно воспользоваться, чтобы построить решение задачи.

Подействуем на уравнение (1) оператором $\hat{a}$, *в результате получаем :*

$$\hat{a}\,(2\hat{a}^+\hat{a} + 1)\psi = (2\hat{a}\,\hat{a}^+ + 1)\hat{a}\,\psi = \varepsilon\hat{a}\psi.$$

Если ввести теперь обозначение $\phi = \hat{a}\psi$, *то последнее уравнение приобретает такой вид :*

$$(2\hat{a}\,\hat{a}^+ + 1)\phi = \varepsilon\phi$$

или

$$(2\hat{a}\,\hat{a}^+ - 1)\phi = \hat{H}_0\phi = (\varepsilon - 2)\,\phi.$$

Отсюда следует, что функция $\phi = \hat{a}\psi$ *также является решением обезразмеренного уравнения Шредингера, но с энергией* $\varepsilon - 2$, *а не* ε. *Пусть* ε_n *– некоторый энергетический уровень гармонического осциллятора, соответствующий состоянию с волновой функцией* ψ_n.

Тогда волновая функция $\phi_n = \hat{a}\psi_n$ *является волновой функцией состояния* с *энергией* $\varepsilon_{n-1} = \varepsilon_n - 2$.

Т.е. *можем записать с точночтью до некоторого числового множителя* γ_n^- :

$$\hat{a}\psi_n = \phi_n = \gamma_n^-\psi_{n-1}$$

Это соотношение можно трактовать, как то, что оператор $\hat{a}$ *превращает функцию* с *номером n в функцию* с *номером* $n - 1$.

Поэтому этот оператор называют ***понижающим оператором****. Аналогичным образом (см. лекции и учебники) можно доказать, что оператор* $\hat{a}^+$ *действует следующим образом :*

$$\hat{a}^+\psi_n = \gamma_n^+\psi_{n+1-1}.$$

Поэтому этот оператор называется ***повышающим****.*

Вычисление постоянных γ_n^+ и γ_n^- *дает :*

$$\gamma_n^+ = \sqrt{n+1}, \quad \gamma_n^- = \sqrt{n}$$

В результате действие повышающего и понижающего оператора можно записать так :

$$\hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}, \quad \hat{a}^+\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}. \qquad (3)$$

Эти соотношения мы будем использовать в дальнейшем.

Они упрощают целый ряд вычислений, связанных с гармоническим осциллятором.

Можно теперь перейти к размерным величинам :

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}\right), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}\right)$$

или

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

С *помощью соотношений* (3) *можно вычислить все волновые функции гармонического осциллятора.*

Первый шаг. Поскольку энергия гармонического осциллятора может быть только положительной, то существует самый нижний энергетический уровень E_0, ниже которого других уровней нет.

Поскольку соотношение для понижающего оператора должно выполняться и для этого уровня, а более низкого нет, то имеем :

$$\hat{a}\psi_0 = 0$$

Это уравнение можно записать так :

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{d}{dz} + z\right)\psi_0 = 0$$

Разделяя переменные, находим :

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -zdz$$

Отсюда :

$$\psi_0 = Ce^{-\frac{z^2}{2}}.$$

Условие нормировки дает :

$$C^2\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_0|^2\,dz = C^2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-z^2}\,dz = C^2\sqrt{\pi} = 1$$

Отсюда

$$C = \frac{1}{(\pi)^{\frac{1}{4}}}$$

Окончательно :

$$\psi_0 = \frac{1}{(\pi)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{z^2}{2}}$$

Остальные функции вычисляются так :

$$\psi_1 = \hat{a}^+\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{dz} + z\right)\psi_0 = \frac{1}{(\pi)^{\frac{1}{4}}}\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{d}{dz} + z\right)e^{-\frac{z^2}{2}} = \frac{1}{(\pi)^{\frac{1}{4}}}\sqrt{2}\,ze^{-\frac{z^2}{2}}$$

Проверяем:

Определяем функцию ψ_0 (*идентификатор* psi *зарезервирован в* *Maple*. *Во избежании ошибок используем* Phi)

```
> Phi[0]:=(z)->exp(-z^2/2)/Pi^(1/4);
```

$$\Phi_0 := z \to \frac{e^{-\frac{1}{2}z^2}}{\pi^{1/4}} \qquad \textbf{(3)}$$

Применяем действие повышающего оператора $\psi_1 = \hat{a}^+\psi_0$

$$\psi_1 = \hat{a}\,\psi_0 \qquad \textbf{(4)}$$

```
> Phi[1]:=(z)->-(subs(y=z,diff(Phi[0](y),y))-z*Phi[0](z))/sqrt(2);
```

$$\Phi_1 := z \to -\frac{subs\left(y = z, \frac{d}{dy}\Phi_0(y)\right) - z\,\Phi_0(z)}{\sqrt{2}} \qquad \textbf{(5)}$$

```
> Phi[1](z);
```

$$\frac{z\,e^{-\frac{1}{2}z^2}\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \qquad \textbf{(6)}$$

```
>
> Phi[2]:=(z)->-(subs(y=z,diff(Phi[1](y),y))-z*Phi[1](z))/sqrt(2*2);
  Phi[3]:=(z)->-(subs(y=z,diff(Phi[2](y),y))-z*Phi[2](z))/sqrt(2*3);
  Phi[4]:=(z)->-(subs(y=z,diff(Phi[3](y),y))-z*Phi[3](z))/sqrt(2*4);
  Phi[5]:=(z)->-(subs(y=z,diff(Phi[4](y),y))-z*Phi[4](z))/sqrt(2*5);
```

```
> factor(Phi[2](z));
  factor(Phi[3](z));
  factor(Phi[4](z));
  factor(Phi[5](z));
```

$$\frac{1}{2}\,\frac{e^{-\frac{1}{2}z^2}\,\sqrt{2}\,\left(2z^2-1\right)}{\pi^{1/4}}$$

$$\frac{1}{6}\,\frac{z\,e^{-\frac{1}{2}z^2}\,\sqrt{2}\,\left(2z^2-3\right)\sqrt{6}}{\pi^{1/4}}$$

$$\frac{1}{12}\,\frac{e^{-\frac{1}{2}z^2}\,\sqrt{6}\,\left(4z^4-12z^2+3\right)}{\pi^{1/4}}$$

$$\frac{1}{60}\,\frac{z\,e^{-\frac{1}{2}z^2}\,\sqrt{6}\,\left(4z^4-20z^2+15\right)\sqrt{10}}{\pi^{1/4}} \qquad (8)$$

Проверяем нормировку численно

```
> for k from 0 to 5 do
      J:=int(Phi[k](z)^2,z=-infinity..infinity);
      print("k=",k," J=",J);
  end do:
```

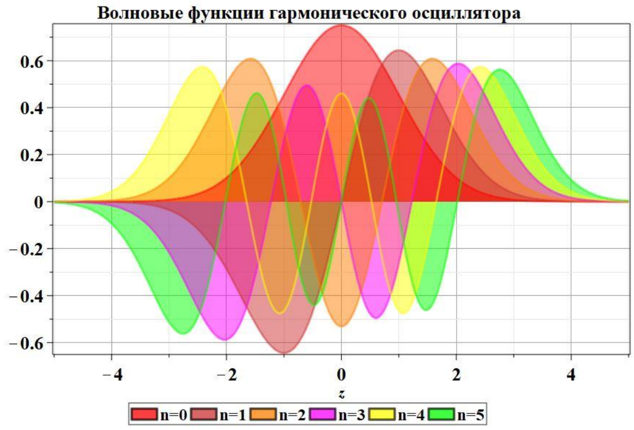
"k=", 0, " J=", 1
"k=", 1, " J=", 1
"k=", 2, " J=", 1
"k=", 3, " J=", 1
"k=", 4, " J=", 1
"k=", 5, " J=", 1 (9)

Строим графики волновых функций и плотности вероятности

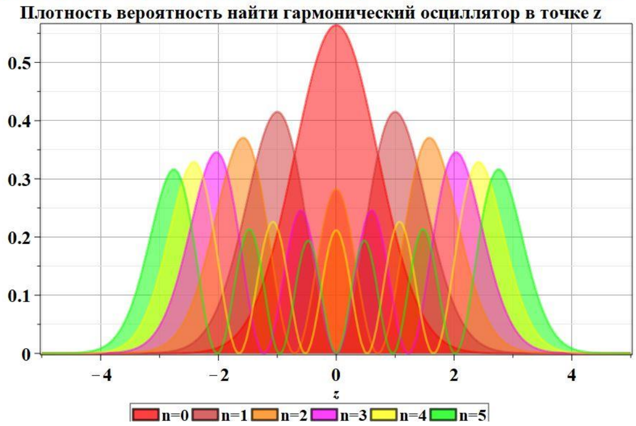
```
> PHI:=[seq(Phi[k](z),k=0..5)]:
  PHI2:=[seq(Phi[k](z)^2,k=0..5)]:
  LEG:=[seq(sprintf("n=%d",n),n=0..5)];
```

LEG := ["n=0", "n=1", "n=2", "n=3", "n=4", "n=5"] (10)

```
> plot(PHI,z=-5..5,frm,color=[red,orange,coral,magenta,yellow,green],filled=true,transparency=0.5,thickness=3,
  title="Волновые функции гармонического осциллятора",legend=LEG);
```




```
> plot(PHI2,z=-5..5,frm,color=[red,orange,coral,magenta,yellow,green],filled=true,transparency=0.5,thickness=3,
  title="Плотность вероятности найти гармонический осциллятор в точке z",legend=LEG);
```



Зная то, как меняются значения безразмерной энергии при изменении номера уровня

$$\varepsilon_{n-1} = \varepsilon_n - 2$$

можно вычислить значения всех энергий, начиная с *энергии* ε_0. *Перепишем соотношение для энергий так* :

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{n-1} + 2.$$

Тогда для $n = 1$:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 + 2$$

для $n = 2$:

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + 2 = \varepsilon_0 + 4$$

и т.д.

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{n-1} + 2 = ... = \varepsilon_0 + 2\,n.$$

Найдем ε_0 *с помощью прямых вычислений. Имеем* :

$$\hat{H}_0\psi_0 = \left(-\frac{d^2}{dz^2} + z^2\right)\psi_0 = \frac{1}{(\pi)^{\frac{1}{4}}}\left(-\frac{d^2}{dz^2} + z^2\right)e^{-\frac{z^2}{2}} = \frac{1}{(\pi)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{z^2}{2}} = \varepsilon_0\psi_0$$

Отсюда

$$\varepsilon_0 = 1$$

В результате :

$$\varepsilon_n = 1 + 2\,n$$

В размерном виде находим :

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2\,n + 1), \;\; n = 0,\, 1, ...$$

Расстояние между уровнями энергии квантового гармонического осциллятора одинаковы!

Величина шага между уровнями определяется собственной частотой гармонического осциллятора.

Волновые функции состояний гармонического осциллятора для краткости представляют так :

$$\varepsilon_{n-1} = \varepsilon_n - 2$$

Можно вычислить значения всех энергий, начиная с *энергии* ε_0. *Перепишем соотношение для энергий так* :

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{n-1} + 2.$$

Тогда для $n = 1$:

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 + 2$$

для $n = 2$:

$$\varepsilon_2 = \varepsilon_1 + 2 = \varepsilon_0 + 4$$

и т.д.

$$\varepsilon_n = \varepsilon_{n-1} + 2 = ... = \varepsilon_0 + 2\,n.$$

Найдем ε_0 *с помощью прямых вычислений. Имеем* :

$$\hat{H}_0\psi_0 = \left(-\frac{d^2}{dz^2} + z^2\right)\psi_0 = \frac{1}{(\pi)^{\frac{1}{4}}}\left(-\frac{d^2}{dz^2} + z^2\right)e^{-\frac{z^2}{2}} = \frac{1}{(\pi)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{z^2}{2}} = \varepsilon_0\psi_0$$

Отсюда

$$\varepsilon_0 = 1$$

В результате :

$$\varepsilon_n = 1 + 2\,n$$

В размерном виде находим :

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2\,n + 1), \;\; n = 0,\, 1, ...$$

Расстояние между уровнями энергии квантового гармонического осциллятора одинаковы!

Величина шага между уровнями определяется собственной частотой гармонического осциллятора.

Волновые функции состояний гармонического осциллятора для краткости представляют так :

$$\psi_n(x) = H_n(x)\,e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}},$$

Здесь $H_n(x)$ – *полиномы Эрмита.*

$$H_0(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}}, \;\; H_1(x) = \frac{x}{x_0}\frac{\sqrt{2}}{\pi^{1/4}}, \;\; H_2(x) = \frac{1}{2}\,\frac{\sqrt{2}\left(2\left(\frac{x}{x_0}\right)^2 - 1\right)}{\pi^{1/4}}, \ldots$$

Здесь $x_0 = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}$.

Построим график уровней **:**

```
> gEn:=[seq((2*k+1)/2,k=0..7)];
  TXTE:=[seq([1.5,(2*k+1)/2+0.5,sprintf("E[%d]=hw%2.1f",k,(2*k+1)/2)],k=0..7)]:
```

$$gEn := \left[\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}, \frac{11}{2}, \frac{13}{2}, \frac{15}{2}\right] \tag{11}$$

```
> picEn:=plot(gEn,x=0..4,frm,color=red,thickness=5,view=[0..4,0..9],title="Энергетические уровни гармонического осциллятора"):
> display(picEn,textplot(TXTE,color=coral));
```

Вычисление дисперсий (флуктуаций) состояний гармонического осциллятора

1. Вычисление дисперсий (флуктуаций) координаты

Решим задачу о вычислении дисперсий с помощью повышающих и понижаюших операторов.

Обратим внимание на то, что потенциальная энергия гармонического осциллятора является четной функцией x. Поэтому оператор Гамильтона гармонического осциллятора коммутирует с оператором инверсии. Следовательно, собственные состояния с фиксированной энергией гармонического осциллятора
являются либо четными, либо нечетными функциями. В этом случае квадрат модуля волновых функций,
т.е. плотность вероятности найти гармонический осциллятор в точке z, является четной функцией. Отсюда следует, что средняя координата $\bar{x} = 0$. Действительно, средняя координата в состоянии с волновой функцией $\psi_n(x)$ вычисляется по формуле:

$$\bar{x}_n = \int_0^a x\left(\psi_n(x)\right)^* \psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^a x\left|\psi_n(x)\right|^2 \mathrm{d}x.$$

Но поскольку $\left|\psi_n(x)\right|^2$ является четной функцией, то $x\left|\psi_n(x)\right|^2$ является нечетной. Поэтому интеграл от нее в симметричных пределах равен нулю. Поэтому $\bar{x}_n = 0$.

Тогда дисперсия координаты в состоянии с волновой функцией $\psi_n(x)$ вычисляется по формуле:

$$Dx_n = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi_n(x)\right)^* x^2 \psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \left|\psi_n(x)\right|^2 \mathrm{d}x = \left(\psi_n, x^2 \psi_n\right).$$

Представим оператор координаты $\hat{x}$ в следующей форме:

$$\hat{x} = \hat{z}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{2}\,\frac{1}{2}\left(\hat{a}^+ + \hat{a}\right) = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{2}\,\frac{1}{2}\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z} + z + z + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\right)$$

Тогда выражение для дисперсии можно записать таким образом:

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

$$= \frac{1}{2}\,\frac{\hbar}{m\omega}\left(\psi_n, \left(\left(\hat{a}^+\right)^2 + \hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^2\right)\psi_n\right)$$

Используя формулы для действия повышающего и понижающего операторов и условия ортонормированности функций $\psi_n(x)$,

имеем :

$$\left(\psi_n, \left(\hat{a}^+\right)^2 \psi_n\right) = \sqrt{n+1}\left(\psi_n, \left(\hat{a}^+\right)\psi_{n+1}\right) = \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\left(\psi_n, \psi_{n+2}\right) = 0\,,$$

$$\left(\psi_n, \left(\hat{a}\right)^2 \psi_n\right) = \sqrt{n}\left(\psi_n, \left(\hat{a}\right)\psi_{n-1}\right) = \sqrt{n-1}\sqrt{n}\left(\psi_n, \psi_{n-2}\right) = 0,$$

$$\left(\psi_n, \left(\hat{a}^+\hat{a}\right)\psi_n\right) = \sqrt{n}\left(\psi_n, \left(\hat{a}^+\right)\psi_{n-1}\right) = \sqrt{n}\sqrt{n}\left(\psi_n, \psi_n\right) = n,$$

$$\left(\psi_n, \left(\hat{a}\hat{a}^+\right)\psi_n\right) = \sqrt{n+1}\left(\psi_n, \left(\hat{a}\right)\psi_{n+1}\right) = \sqrt{n+1}\sqrt{n+1}\left(\psi_n, \psi_n\right) = n+1.$$

Используем эти соотношения, находим окончательно :

$$Dx_n = \left(\psi_n, x^2 \psi_n\right) = \frac{1}{2}\,\frac{\hbar}{m\omega}(n+n+1) = \frac{1}{2}\,\frac{\hbar}{m\omega}(2n+1).$$

В этих вычислениях важно то, что не требуется явно вычислять интегралы при вычислении средних.

Флуктуацией называется стандартное отклонение распределения вероятностей, т.е корень из дисперсии.

Флуктуация распределения вероятностей :

$$\sigma_{x,n} = \sqrt{Dx_n} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\sqrt{n+\frac{1}{2}}$$

Проверка

```
> for k from 0 to 5 do
      J:=int(z^2*Phi[k](z)^2,z=-infinity..infinity);
      print("k=",k," Проверка: J=",J," Теория: Jt=",(2*k+1)/2);
  end do:
```

"k=", 0, " Проверка: J=", $\frac{1}{2}$, " Теория: Jt=", $\frac{1}{2}$

"k=", 1, " Проверка: J=", $\frac{3}{2}$, " Теория: Jt=", $\frac{3}{2}$

"k=", 2, " Проверка: J=", $\frac{5}{2}$, " Теория: Jt=", $\frac{5}{2}$

"k=", 3, " Проверка: J=", $\frac{7}{2}$, " Теория: Jt=", $\frac{7}{2}$

"k=", 4, " Проверка: J=", $\frac{9}{2}$, " Теория: Jt=", $\frac{9}{2}$

"k=", 5, " Проверка: J=", $\frac{11}{2}$, " Теория: Jt=", $\frac{11}{2}$ **(12)**

2. Вычисление дисперсий (флуктуаций) импульса

Дисперсия импульса в состоянии с волновой функцией $\psi_n(x)$ вычисляется по формуле:

$$Dp_n = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi_n(x)\right)^* \hat{P}^2\psi_n(x)\,\mathrm{d}x = \left(\psi_n,\ \hat{P}^2\psi_n\right).$$

Представим оператор импульса $\hat{P}$ в следующей форме:

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

Теперь:

$$Dp_n = \left(\psi_n,\ \hat{P}^2\psi_n\right). = -\frac{1}{2}\hbar\, m\omega\left(\psi_n,\ \left((\hat{a}^{+})^2 - \hat{a}^{+}\hat{a} - \hat{a}\hat{a}^{+} + \hat{a}^2\right)\right)\psi_n\Big)$$

Используя вычисления в предыдущей задаче, находим :

$$Dp_n = \frac{1}{2}\hbar\, m\omega\left(2\,n+1\right)$$

Флуктуацией импульса является величина :

$$\sigma_{p,n} = \sqrt{Dp_n} = \sqrt{\hbar\, m\omega}\sqrt{n+\frac{1}{2}}$$

Задания

Вычислите средние значения в состояниях ψ_n для операторов $\hat{x}\hat{p}$ и $\hat{p}\hat{x}$!

\>

3. Вычисление моментов высших порядков

Вычисление степеней операторов $\hat{x}$ и $\hat{p}$ может быть произведено аналогично, но с использованием расширенной таблицы средних от операторов $\hat{a}^{+}$ и $\hat{a}$.

Эта таблица выглядит так **:**

$$\left(\psi_n,\ (\hat{a}^{+})^k\psi_n\right) = \sqrt{n+1}\left(\psi_n,\ (\hat{a}^{+})^{k-1}\psi_{n+1}\right) = \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\cdots\sqrt{n+k}\left(\psi_n,\ \psi_{n+k}\right) = 0\,,\ k > 0$$

$$\left(\psi_n,\ (\hat{a})^m\psi_n\right) = \sqrt{n}\left(\psi_n,\ (\hat{a})^{m-1}\psi_{n-1}\right) = \sqrt{n}\sqrt{n-1}\cdots\sqrt{n-m+1}\left(\psi_n,\ \psi_{n-m}\right) = 0,\ m > 0.$$

$$\sqrt{n}\sqrt{n-1}\cdots\sqrt{n-m+1} = \sqrt{\frac{n!}{(n-m)!}},$$

$$\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\cdots\sqrt{n+k} = \sqrt{\frac{(n+k)!}{n!}}.$$

$$\left(\psi_n, (\hat a^+)^k (\hat a)^m \psi_n\right) = \sqrt{n}\sqrt{n-1}\cdots\sqrt{n-m+1}\left(\psi_n, (\hat a^+)^k \psi_{n-m}\right) =$$

$$= \sqrt{n}\sqrt{n-1}\cdots\sqrt{n-m+1}\cdot\sqrt{n-m+1}\sqrt{n-m+2}\cdots\sqrt{n-m+k}\left(\psi_n, \psi_{n+k-m}\right) =$$

$$= \begin{cases} 0, & k \neq m \\ n(n-1)\cdots(n-k+1) =, & k = m \end{cases},$$

$$\left(\psi_n, (\hat a)^m (\hat a^+)^k \psi_n\right) = \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\cdots\sqrt{n+k}\left(\psi_n, (\hat a)^m \psi_{n+k}\right) =$$

$$= \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\cdots\sqrt{n+k}\ \sqrt{n+k}\sqrt{n+k-1}\cdots\sqrt{n+k-m+1}\left(\psi_n, \psi_n\right) =$$

$$= \begin{cases} 0, & k \neq m \\ (n+1)(n+2)\cdots(n+k) =, & k = m \end{cases}$$

Кроме этого, необходимо помнить, что операторы $\hat a^+$ и $\hat a$ не коммутируют между собой :

$[\hat a, \hat a^+] = \hat a \hat a^+ - \hat a^+ \hat a = 1$ (***Докажите это соотношение самостоятельно***)

В частности имеем :

$$(\hat a^+ + \hat a)^k = (\hat a^+)^k + \hat a(\hat a^+)^{k-1} + (\hat a^+)^{k-1}\hat a + \hat a^+ \hat a(\hat a^+)^{k-2} + (\hat a^+)^2 \hat a(\hat a^+)^{k-3} + \cdots +$$
$$+ \hat a^2(\hat a^+)^{k-2} + \hat a(\hat a^+)^{k-2}\hat a + (\hat a^+)^{k-1}\hat a^2 + (\textit{все возможные перестановки операторов } \hat a^+ \text{ и } \hat a \text{ и } \textit{их степеней})$$

Примеры:

$$(\hat a^+ + \hat a)^3 = (\hat a^+)^3 + \hat a(\hat a^+)^2 + (\hat a^+)^2\hat a + \hat a^+\hat a\hat a^+ + \hat a^+(\hat a)^2 + (\hat a)^2\hat a^+ + \hat a\hat a^+\hat a + (\hat a)^3$$

$$(\hat a^+ + \hat a)^4 = (\hat a^+)^4 + \hat a(\hat a^+)^3 + (\hat a^+)^3\hat a + (\hat a^+)^2\hat a\hat a^+ + \hat a^+\hat a(\hat a^+)^2 +$$
$$+ (\hat a^+)^2(\hat a)^2 + (\hat a)^2(\hat a^+)^2 + \hat a(\hat a^+)^2\hat a + \hat a^+\hat a^2\hat a^+ + \hat a^+\hat a\hat a^+\hat a + \hat a\hat a^+\hat a\hat a^+ +$$
$$+ \hat a^+\hat a^3 + \hat a^3\hat a^+ + \hat a\hat a^+\hat a^2 + \hat a^2\hat a^+\hat a + (\hat a)^4$$

$$(\hat a^+ - \hat a)^3 = (\hat a^+)^3 - \hat a(\hat a^+)^2 - (\hat a^+)^2\hat a - \hat a^+\hat a\hat a^+ + \hat a^+(\hat a)^2 + (\hat a)^2\hat a^+ + \hat a\hat a^+\hat a - (\hat a)^3$$

$$(\hat a^+ - \hat a)^4 = (\hat a^+)^4 - \hat a(\hat a^+)^3 - (\hat a^+)^3\hat a - (\hat a^+)^2\hat a\hat a^+ - \hat a^+\hat a(\hat a^+)^2 +$$
$$+ (\hat a^+)^2(\hat a)^2 + (\hat a)^2(\hat a^+)^2 + \hat a(\hat a^+)^2\hat a + \hat a^+\hat a^2\hat a^+ + \hat a^+\hat a\hat a^+\hat a + \hat a\hat a^+\hat a\hat a^+ -$$
$$- \hat a^+\hat a^3 - \hat a^3\hat a^+ - \hat a\hat a^+\hat a^2 - \hat a^2\hat a^+\hat a + (\hat a)^4$$

Для вычисления средних значений полезно помнить, что **только при равенстве степеней операторов $\hat a^+$ и $\hat a$ в произведении среднее значение будет отличаться от нуля**. Поэтому достаточно выписать только такие слагаемые в вычисляемом выражении. Отсюда следует, что среднее значение операторов и $\hat p^{2k+1}$ будут равны нулю, поскольку в записи их через операторы $\hat a^+$ **и** $\hat a$ будут содержаться слагаемые не равных степеней этих операторов. См. примеры выше.

Поэтому, например,

$$\left(\psi_n, \hat x^4\psi_n\right) = \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2\left(\psi_n, (\hat a^+ + \hat a)^4\psi_n\right) =$$

$$= \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2\left(\psi_n, \left[(\hat a^+)^2(\hat a)^2 + (\hat a)^2(\hat a^+)^2 + \hat a(\hat a^+)^2\hat a\right]\psi_n\right) +$$
$$+ \left(\psi_n, \left[\hat a^+\hat a^2\hat a^+ + \hat a^+\hat a\hat a^+\hat a + \hat a\hat a^+\hat a\hat a^+\right]\psi_n\right) =$$

$$= \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2[(n-1)(n-2)+(n+1)(n+2)+n(n+1)+n(n+1)+n\cdot n+(n+1)(n+1)] = \frac{1}{4}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^2(6n^2 + 4n + 5)$$

```
> simplify((n-1)*(n-2)+(n+1)*(n+2)+n*(n+1)+n*(n+1)+n^2+(n+1)^2);
```

$$6n^2 + 4n + 5 \qquad (13)$$

Задания

Вычислите средние значения в состояниях ψ_n для операторов $\hat x^2\hat p^2$ и $\hat p^2\hat x^2$ и $\hat p^4$.

Попробуйте найти решения, вычисляя интегралы в Maple для нескольких первых функций ψ_n