Семинар 2. Одномерное движение. Связанные состояния

Степанов Николай

17 сентября 2016 г.

Общие свойства уравнения Шрёдингера

Построение квантомеханического описания движения классической системы сводится к замене в классической функции Гамильтона $H(x,p)$ значения координат и импульса на соответствующие им операторы[1]. В этом семинаре мы будем рассматривать задачи об одной квантовой частице, движущейся в потенциале $U(x)$; Гамильтониан такой системы даётся выражением:

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

Мы будем интересоваться **стационарными состояниями** — собственными состояниями оператора энергии[2] $\hat{H}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle$. В общем случае, спектр Гамильтониана может включать в себя как дискретный спектр связанных состояний, так и непрерывный спектр бегущих волн.

Важно! **Связанные состояния** состояния характеризуются тем, что для них волновая функция на больших расстояниях достаточно быстро спадает, а интеграл $\langle\psi|\psi\rangle = \int dx|\psi(x)|^2$ сходится. **Состояния непрерывного спектра** ненормируемы, и интеграл $\int dx|\psi(x)|^2$, вообще говоря, расходится. Примером волновой функции непрерывного спектра может служить обыкновенная плоская волна $\psi(x) = e^{ikx}$.

О способе нормировки волновых функций непрерывного спектра мы поговорим на следующем семинаре; а пока мы будем только работать со связанными состояниями.

Рассмотрим для начала случай локализованных потенциалов. Пусть на бесконечности потенциал достаточно быстро спадает $U(x \to \pm\infty) \to 0$. Тогда в уравнении Шрёдингера в координатном представлении можно приближённо выбросить член с потенциальной энергией; получится следующее уравнение и его решение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x) \Rightarrow \begin{cases} \psi(x) &= C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0 \\ \psi(x) &= C_1' e^{\kappa x} + C_2' e^{-\kappa x}, \quad E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} < 0 \end{cases}$$

Непрерывный спектр в таком виде соответствует положительной энергии, а связанные состояния — отрицательным. Более того, при $x > 0$, константа C_1' должна тождественно зануляться, а при $x < 0$ должна зануляться константа C_2'. Эти два условия оказывается возможным выполнить только для дискретного набора энергий, которые и дают спектр связанных состояний.

Осцилляторная теорема Решим задачу о частице в потенциале с бесконечными стенками:

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L \\ \infty, & \text{иначе} \end{cases}$$

Поскольку потенциальная энергия, вообще говоря, может быть бесконечно большой, то у этой задачи не имеется непрерывного спектра, а есть только дискретный. Спектр задачи тривиален, он даётся (с точностью до нормировки)

$$\psi_n(x) = \sin(k_n x), \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}, \quad k_n L = \pi n$$

Важно! Можно обратить внимание, что у волновой функции основного состояния нет узлов; а у n-той волновой функции $\psi_n(x)$ имеется ровно $n-1$ узел. Это свойство одномерного движения носит самый общий характер, и называется **осцилляторной теоремой**.

[1] Вообще говоря, если классическая функция Гамильтона содержит члены вида $x{\cdot}p$, то соответствующий оператор $\hat{x}{\cdot}\hat{p}$ не является эрмитовым. Рецепт в таком случае сводится к процедуре симметризации; например, комбинация $\frac{1}{2}(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})$ уже является эрмитовой.

[2] Если полный спектр Гамильтониана найден, то решение нестационарного уравнения Шрёдингера $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,|\psi(t)\rangle = \hat{H}\,|\psi(t)\rangle$ сводится к разложению по базису собственных состояний с дальнейшей тривиальной эволюцией: $|\psi(t)\rangle = \sum_n \langle n|\psi(0)\rangle \cdot |n\rangle \cdot e^{-iE_n t/\hbar}$.

Мелкая яма

Масштабы Рассмотрим произвольный локализованный потенциал. Пусть характерная глубина ямы равна U_0, а характерная его ширина — a; примером такого потенциала может служить, например, потенциал $U(x) = -U_0 \exp(-x^2/a^2)$. Пусть волновая функция связанного состояния имеет масштаб l; тогда характерный масштаб импульса равен $p \sim \frac{\hbar}{l}$, а масштаб кинетической энергии — $\frac{\hbar^2}{ml^2}$. Можно заметить, что чем сильнее мы хотим локализовать волновую функцию, тем сильнее повышается её кинетическая энергия. Очевидным образом, кинетическая энергия не может быть больше U_0 (в противном случае, частица просто «вылетит» из ямы, а соответствующее состояние будет состоянием непрерывного спектра), и это условие задаёт характерный масштаб длины, на котором меняется волновая функция внутри ямы $\frac{\hbar^2}{ml^2} \sim U_0$; в зависимости от соотношений l и a, различают разные случаи. Мы будем интересоваться случаем **мелкой ямы**, при которой $l \gg a$. Подобный анализ показывает, что внутри ямы волновая функция связанного состояния практически не меняется, а её характерный масштаб сильно больше a. Поскольку большую часть времени частица проводит вне ямы, где потенциальная энергия очень мала, то характерный масштаб такой волновой функции даётся κ^{-1} (напомним, что этот масштаб связан с энергией связанного состояния $E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$).

Таким образом, мы приходим к следующим качественным выводам. Мелкая яма характеризуется условием $\frac{\hbar^2}{ma^2} \gg U_0$; если в ней имеется связанное состояние, то его энергия $|E| \ll U_0$; а её характерный масштаб в координатном пространстве — большой, и даётся $\kappa^{-1} \gg a$. Благодаря этим общим оценкам, характер волновой функции в мелкой яме оказывается слабо чувствительным к непосредственному виду потенциала, и задачу можно решить явно для довольно широкого класса потенциалов.

УШ в импульсном представлении Тут и далее мы положим $\hbar = 1$.

Одним из способов решения этой задачи является решение при помощи *импульсного представления*[3] — а именно, мы будем работать в базисе собственных состояний оператора импульса. Волновую функцию мы будем обозначать $\langle p|\psi\rangle \equiv \psi(p)$. Чтобы записать уравнение Шрёдингера в импульсном представлении, необходимо его спроекцировать на бра-вектор $\langle p|$, то есть рассмотреть $\langle p|\hat{H}|\psi\rangle = E\langle p|\psi\rangle$. Кинетическая энергия в таком случае запишется тривиально (этот оператор *диагонален* в импульсном представлении):

$$\langle p|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\psi\rangle = \frac{p^2}{2m}\psi(p)$$

Потенциальная энергия не является диагональным оператором; поэтому нам пригодятся её матричные элементы в этом базисе:

$$\langle p|U(\hat{x})|p'\rangle = \langle p|U(\hat{x})\underbrace{\int dx\,|x\rangle\langle x|}_{\hat{\mathbb{I}}}|p'\rangle = \int dx U(x)\langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle = \int dx U(x)e^{-i(p-p')x} = U_{p-p'},$$

из чего мы заключаем, что эти матричные элементы тождественно совпадают с преобразованием Фурье от потенциала. В таком случае, потенциальная энергия записывается в импульсном представлении в следующем виде:

$$\langle p|U(\hat{x})|\psi\rangle = \langle p|U(\hat{x})\underbrace{\int (dp')\,|p'\rangle\langle p'|}_{\hat{\mathbb{I}}}|\psi\rangle = \int (dp')U_{p-p'}\psi(p').$$

Полученный объект называется свёрткой двух функций. Тут мы ввели удобное обозначение $(dp) = \frac{dp}{2\pi}$[4]; это обозначение позволяет нам писать общие выражения для пространства произвольной размерности. Таким образом, уравнение Шрёдингера в импульсном представлении записывается в следующем виде:

$$\boxed{\frac{p^2}{2m}\psi(p) + \int (dp')\psi(p')U_{p-p'} = E\psi(p)}$$

Вместо дифференциального уравнения, которым является уравнение Шрёдингера в координатном представлении, мы получили интегральное уравнение. Тем не менее, это уравнение иногда устроено проще.

[3] Другой способ основан на явном написании ассимптотик волновой функции и их сшивок; этот способ изложен в [ЛЛ, глава 6 «Теория возмущений», пар. 45 «Потенциальная энергия как возмущение», задачи 1 и 2]

[4] это обозначение обобщается на случай произвольной размерности как $(d\boldsymbol{p}) = \frac{d^d\boldsymbol{p}}{(2\pi)^d}$

Решение Теперь приступим к обсуждению задачи про мелкую яму. Мы выяснили, что характерный масштаб волновой функции в координатном представлении $\psi(x)$ — это большой масштаб $\kappa^{-1} \gg a$. Это означает, что в импульсном представлении, напротив, волновая функция $\psi(p)$ является локализованной вблизи нуля на малом масштабе $\sim \kappa$. С другой стороны, масштаб $U(x)$ — это $a \ll \kappa^{-1}$; в свою очередь, масштаб $U_{p-p'}$ — это большой масштаб a^{-1}.

Таким образом, из-за такого разделения масштабов, в свёртке $\int(dp')\psi(p')U_{p-p'}$ можно вынести «медленную огибающую» $U_{p-p'}$ за знак интеграла, положив $p' = 0$. Это приводит нас к следующему уже приближённому уравнению (обратим внимание, что как E, так и U — отрицательны, поскольку мы интересуемся связанными состояниями):

$$\frac{p^2}{2m}\psi(p) + U_p \int (dp')\psi(p') \approx E\psi(p) \Rightarrow \psi(p) \approx -\frac{U_p}{|E| + \frac{p^2}{2m}} \int (dp')\psi(p')$$

Заметим, что после этого приближения, уравнение стало алгебраическим вместо интегрального; действительно, $\int(dp')\psi(p') \equiv \psi(x = 0) = \text{const}$. Перед интегралом стоит комбинация двух функций; обратим внимание, что масштаб, задаваемый «огибающей» $(\frac{p^2}{2m} + |E|)^{-1}$ — это $p \sim \kappa$; в то время, как масштаб U_p — это $p \sim a^{-1}$; что сильно больше. Поэтому покуда $p \ll a^{-1}$, мы можем заменить $U_p \approx U_{p=0} = \int dx U(x)$.

Наконец, проинтегрировав получившееся уравнения по (dp) и сократив на интеграл, мы получаем следующее *уравнение самосогласования*, из которого можно извлечь энергию:

$$|U_{p=0}| \int \frac{(dp)}{|E| + \frac{p^2}{2m}} \approx 1$$

Перейдём к обсуждению случаев разных размерностей.

Размерность $d = 1$ При малых энергиях, этот интеграл расходится на малых импульсах, и является конечным на больших[5]. Таким образом, подбирая достаточно маленькую энергию, можно прийти к тому, что знак равенства будет иметь место. Беря этот интеграл явно, мы получаем (восстанавливая зависимость от $\hbar$):

$$|E| \approx \frac{m}{2\hbar^2} \left| \int dx U(x) \right|^2$$

Полученный интеграл имеет масштаб $\sim U_0 \cdot a$; тем самым ответ имеет порядок $|E| \sim U_0 \cdot \frac{U_0}{\hbar^2/ma^2} \ll U_0$. Тем самым, мы получаем, что все наши предыдущие рассуждения действительно истинны; а именно, яма действительно мелкая а масштаб волновой функции действительно большой.

Размерность $d = 2$ Интеграл расходится логарифмически на малых и на больших импульсах. На больших импульсах очевидным образом интеграл нужно обрезать на масштабах $\sim 1/a$, поскольку это уравнение было выведено именно в таком предположении (поскольку интеграл логарифмический, то он нечувствителен к этой обрезке; она меняет лишь константу под логарифмом). Но, поскольку на малых импульсах расходимость тоже всего лишь логарифмическая, то чтобы сделать этот интеграл порядка 1, уровень энергии должен быть *ну очень маленьким*. Приступим теперь к непосредственному вычислению:

$$\int \frac{(dp)}{|E| + \frac{p^2}{2m}} = \int \frac{2\pi p dp}{4\pi^2} \frac{1}{|E| + \frac{p^2}{2m}} \approx \frac{m}{\pi} \int_{\sim\sqrt{mE}}^{\sim 1/a} \frac{dp}{p} = \frac{m}{2\pi} \ln \frac{\#}{ma^2|E|}$$

Точность этого выражения следующая: число перед логарифмом определено точно, а в силу неточностях при обрезании, число под логарифмом (#) неизвестно. Для его нахождения нужно решать уравнение Шрёдингера точно; это число уже определяется явным видом потенциала. Тем самым, решая уравнение самосогласования, мы получаем (восстанавливая опять $\hbar$ по размерности):

$$|E| = \# \frac{\hbar^2}{ma^2} \exp\left(-\frac{2\pi\hbar^2}{m} \left| \int U(\boldsymbol{r}) d^2\boldsymbol{r} \right|^{-1} \right)$$

Таким образом, мы определили уровень энергии в мелкой двумерной яме с экспоненциальной точностью; и этот уровень оказывается действительно *экспоненциально* мелким. Ведущая асимптотика даётся этой самой экспонентой, которая может быть оценена как $\exp(-\frac{\hbar^2/ma^2}{U_0}) \lll 1$. Число же в предэкспоненте таким способом определить нельзя.

[5] Расходимость на малых импульсах обычно называют *инфракрасной* расходимостью, а набольших — *ультрафиолетовой.*

Размерность $d \geq 3$ Исследуемый интеграл вообще не расходится на малых импульсах; и тем самым, он практически не зависит от энергии. На больших импульсах он может быть обрезан на масштабе $\sim 1/a$; тем самым, весь интеграл оценивается как $\int \frac{(dp)}{|E|+\frac{p^2}{2m}} \sim mp^{d-2} \sim ma^{2-d}$. С другой стороны, $U_{p=0} \sim U_0 a^d$; тем самым вся комбинация имеет порядок $\frac{U_0}{\hbar^2/ma^2} \ll 1$. Поскольку к тому же это выражение имеет слабую зависимость от энергии, то уравнение самосогласования не имеет решений. Из чего мы заключаем, что в старших размерностях в мелкой яме нет связанных состояний.

Выводы Во-первых, мы получили, что сколь бы мелкой яма ни была, в размерности $d=1$ и $d=2$ в ней всегда имеются связанные состояния, соответствующие дискретному спектру гамильтониана; причём в размерности $d=2$ уровень экспоненциально мелкий. В размерности $d \geq 3$ в мелкой яме уровней энергии нет.

Кроме того, мы выяснили, что уровень энергии в мелкой яме практически не зависит от явного вида потенциала $U(\boldsymbol{r})$, и определяется лишь интегралом $\int d\boldsymbol{r} U(\boldsymbol{r})$. Это позволяет построить моделировать мелкую ямы *дельта-функциональным* потенциалом[6] $U(\boldsymbol{x}) = U_{p=0} \cdot \delta(\boldsymbol{x})$, у которого интеграл точно такой-же (во всяком случае, в одномерье).

Квантовый гармонический осциллятор

Рассмотрим движение частицы в поле гармонического осциллятора $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Поскольку потенциальная энергия $U(x \to \pm\infty) \to \infty$, то в этом потенциале нет непрерывного спектра, а есть только дискретный.

Классическое движение Забудем на небольшое время[7] о квантовой механике, и вспомним, как обстоит жизнь в классической физике. В ней уравнения движения имеют вид уравнений Гамильтона:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H(x,p)}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(x,p)}{\partial x} = -m\omega^2 x$$

Даже в классической механике уравнения оказываются запутанными, но мы можем диагонализовать их перейдя к новым безразмерным переменным:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}p - i\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x \Rightarrow \frac{da}{dt} = -i\omega a \Rightarrow a(t) = ae^{-i\omega t}$$

$$a^* = \frac{1}{\sqrt{2m\omega}}p + i\sqrt{\frac{m\omega}{2}}x \Rightarrow \frac{da^*}{dt} = i\omega a^* \Rightarrow a^*(t) = a^* e^{i\omega t}$$

Алгебра лестничных операторов Далее удобно будет обезразмерить $\hat{p} = \sqrt{m\omega}\hat{p}'$, $\hat{x} = \hat{x}'/\sqrt{m\omega}$. Эта замена очевидным образом сохраняет коммутационные соотношения $[\hat{x}', \hat{p}'] = [\hat{x}, \hat{p}] = i$; гамильтониан же запишется как $\hat{H} = \frac{\omega}{2}(\hat{p}'^2 + \hat{x}'^2)$. Далее писать штрихи мы не будем. Исследуем, какими свойствами обладают соответствующие переменным a, a^* квантовые операторы:

$$\hat{a} = \frac{\hat{p} - i\hat{x}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{a}^\dagger = \frac{\hat{p} + i\hat{x}}{\sqrt{2}} \Rightarrow \hat{p} = \frac{\hat{a}^\dagger + \hat{a}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{x} = \frac{\hat{a}^\dagger - \hat{a}}{\sqrt{2}i};$$

Несложно проверить, что $\boxed{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1}$. Задаваемая этим соотношением алгебра — одна из важнейших алгебр в квантовой механике. Сейчас мы будем исследовать, какие выводы можно сделать, исходя исключительно из неё. Заметим, что оператор $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ — эрмитов и положительно определён. Значит, его собственные состояния образуют базис, в котором мы и будем работать. Эти состояния мы обозначим следующим образом:

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|\lambda_n\rangle = \lambda_n\,|\lambda_n\rangle$$

Во-первых, несложно проверить, что $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\hat{a}] = \hat{a}$. Подействовав этим соотношением на $|\lambda_n\rangle$ и раскрыв явно коммутатор, мы приходим к соотношению

$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\,|\lambda_n\rangle = (\lambda_n - 1)\hat{a}\,|\lambda_n\rangle \Rightarrow \hat{a}\,|\lambda_n\rangle = c_n\,|\lambda_n - 1\rangle\,.$$

Константа c_n может быть выбрана вещественной и определяется из условия нормировки

$$\lambda_n = \langle\lambda_n|\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\,|\lambda_n\rangle = c_n^2\,\langle\lambda_n - 1|\lambda_n - 1\rangle = c_n^2 \Rightarrow c_n = \sqrt{\lambda_n}.$$

[6]На самом деле, это утверждение само по себе достаточно забавно, ведь такой потенциал представляет собой бесконечно глубокую яму бесконечно малой ширины, что противоречит нашим наивным представлениям о мелкой яме. На самом деле, для дельта-функции оказывается более важным то, что она *узкая*, чем то, что она бесконечно глубокая

[7]Для этого, конечно, нужна большая энергия $E \sim \hbar/\Delta t$...

Поскольку спектр оператора $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ обязан быть неотрицательно определённым, то должно быть состояние $|\lambda_0\rangle$ такое, что $\hat{a}\,|\lambda_0\rangle = 0$; из этого мы заключаем, что $\lambda_0 = 0$, а значит $\lambda_n = n$ — спектр оператора $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ даётся неотрицательными целыми числами. Поступая аналогично с коммутатором $[\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger\hat{a}] = -\hat{a}^\dagger$, убедимся, что

$$\hat{a}^\dagger\,|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle$$

Наконец, соберём все соотношения, которые следуют из алгебры, вместе:

$$\boxed{\begin{cases} \hat{a}^\dagger\hat{a}\,|n\rangle & = n\,|n\rangle\,, \quad n \in \mathbb{Z}^+ \\ \hat{a}\,|n\rangle & = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \\ \hat{a}^\dagger\,|n\rangle & = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \end{cases}}$$

Обратим внимание, что все эти рассуждения строятся исключительно на коммутационном соотношении $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$.

Приложения к гармоническому осциллятору Заметим, что гамильтониан выражается через операторы следующим образом:

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

Таким образом, мы сразу понимаем, что у этого гамильтониана имеется дискретный спектр состояний $|n\rangle$; причём их энергия (восстанавливая $\hbar$ по размерности) даётся знаменитой формулой $\boxed{E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})}$. Но на нахождении спектра прелесть этой алгебры не заканчивается; продемонстрируем пару простых примеров.

Сперва давайте найдём волновую функцию основного состояния в координатном представлении. Для этого заметим, что $\hat{a}\,|0\rangle = 0$; подставляя координатное представление оператора $\hat{a}$, мы получаем (возвращаясь к исходным операторам $\hat{x}$ и $\hat{p}$ вместо безразмерных, с которыми мы работали до этого):

$$\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right)\psi_0(x) = 0 \Rightarrow \psi_0(x) = \text{const}\cdot\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)$$

В качестве второго примера, рассмотрим вычисление флуктуации координаты в произвольном состоянии гармонического осциллятора. Для этого заметим:

$$\hat{x}^2\,|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^{\dagger 2} - \hat{a}^2)\,|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left((2n+1)\,|n\rangle - \sqrt{(n+1)(n+2)}\,|n+2\rangle - \sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle\right)$$

Спроецировав это соотношение на состояние $\langle n|$ и воспользовавшись ортогональностью, мы получаем $\langle n|\,\hat{x}^2\,|n\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}(n+\frac{1}{2})$.

Важно! Обратим внимание, что $\langle n|\,U(x)\,|n\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega(n+\frac{1}{2}) = \frac{1}{2}E_n$; из чего следует, что для осциллятора средние значения кинетической и потенциальной энергии совпадают. Это — не случайное совпадение, а является квантомеханическим обобщением классической **теоремы вириала**. В простейшей форме эта теорема гласит, что при движении в потенциале $U(r) \propto r^n$, средние значения кинетической и потенциальной энергии связаны $2\,\langle E_{kin}\rangle = n\,\langle E_{pot}\rangle$.

Список литературы

[ЛЛ] Ландау, Лифшиц, курс теоретической физики, том 3 «Квантовая механика (нерелятивистская теория), 5-е изд. (2002)