Семинар 6. Точно решаемые потенциалы. Часть 2

13 октября 2018 года

Вырожденная гипергеометрическая функция ${}_1F_1(a;b;z)$

Преамбула

На прошлом семинаре обсуждался общий класс гипергеометрических функций ${}_pF_q$; однако для приложений наиболее часто встречаются именно функции ${}_2F_1$ (обсуждённая на прошлом семинаре) и ${}_1F_1$. Она, естественно, тоже определяется через гипергеометрический ряд[1]:

$$ {}_1F_1(a;b;z) = 1 + \frac{a}{b}z + \frac{a(a+1)}{b(b+1)}\frac{z^2}{2} + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{(n)}}{b^{(n)}}\frac{z^n}{n!} \tag{1} $$

Кроме того, альтернативное её определение — через решение дифференциального уравнения следующего вида:

$$ \boxed{zf''(z) + (b-z)f'(z) - af(z) = 0, \quad f(0) = 1} \tag{2} $$

Сразу отметим, что второе линейно-независимое решение, как правило, в нуле сингулярно, и, в чём несложно убедиться, тоже выражается через гипергеометрическую функцию[2]: $f^{(2)}(z) = z^{1-b}{}_1F_1(a-b+1;2-b;z)$. Как и с обычной гипергеометрической функцией, несложно видеть, что при целых отрицательных $b=-n$ функция не определена, а при целых отрицательных $a=-n$ она является конечным полиномом степени n. В общем случае, отношение соседних коэффициентов разложения в ряд ведёт себя как $1/n$, поэтому радиус сходимости этого ряда — бесконечность (в отличии ${}_2F_1$, где радиус сходимости был единичным). Асимптотическое поведение на бесконечности следующее:

$$ \boxed{{}_1F_1(a;b;z) \approx \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} z^{a-b} e^z, \quad z \gg 1} \tag{3} $$

Опять-таки, мы ранее говорили, что всякое уравнение с тремя особенностями сводится к гипергеометрическому виду — так и всякое уравнение с коэффициентами, которые представляют собой линейные функции z приводится к вырожденному гипергеометрическому виду.

Задача

Поучительно будет рассмотреть вырожденную гипергеометрическую функцию на примере простого гармонического осциллятора — частицы в потенциале $U(x) = \frac{m\omega^2x^2}{2}$. Поскольку потенциальная энергия $U(x\to\pm\infty)\to\infty$, то в этом потенциале нет непрерывного спектра, а только дискретный. Переходя к безразмерной координате $y = x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ и вводя безразмерную энергию согласно $E = \hbar\omega(\epsilon + \frac{1}{2})$, мы получаем уравнение Шрёдингера в виде:

$$ \psi''(y) + (2\epsilon + 1 - y^2)\psi(y) = 0 \tag{4} $$

Сделаем замену координат $z = y^2 \Rightarrow y = \sqrt{z}$:

$$ \frac{d\psi}{dy} = 2\sqrt{z}\frac{d\psi}{dz}, \quad \frac{d^2\psi}{dy^2} = 2\sqrt{z}\frac{d}{dz}\left(2\sqrt{z}\frac{d\psi}{dz}\right) = 4z\psi''(z) + 2\psi'(z) \tag{5} $$

$$ 4z\psi''(z) + 2\psi'(z) + (2\epsilon + 1 - z)\psi(z) = 0 \tag{6} $$

Мы получили уравнение с линейными коэффициентами — значит, его можно привести к ${}_1F_1$. Стандартный способ такой процедуры — это выделение асимптотик. В частности, при $z\to\infty$, асимптотический вид уравнения выглядит как $4z\psi''(z) - z\psi(z) = 0 \Rightarrow \psi(z) \approx e^{-z/2}$. Поэтому мы сделаем подстановку $\psi(z) = \chi(z)e^{-z/2}$; получаем:

[1] Обратим внимание, она выражается через ${}_2F_1$ согласно ${}_1F_1(a;c;z) = \lim_{b\to\infty} {}_2F_1(a,b;c;z/b)$

[2] Этот трюк, конечно, работает только при $b \neq 1$. Однако, при $b \to 1$ можно построить предел вида $(f^{(2)} - f^{(1)})/(b-1)$, который и будет давать второе решение

$$z\chi''(z) + \left(\frac{1}{2} - z\right)\chi'(z) + \frac{\epsilon}{2}\chi(z) = 0 \tag{7}$$

В нашем конкретном случае $b = \frac{1}{2}$, $a = -\frac{\epsilon}{2}$, и поэтому общее решение уравнения записывается следующим образом:

$$\chi(z) = C_1 \cdot {}_1F_1\left(-\frac{\epsilon}{2}; \frac{1}{2}; z\right) + C_2\sqrt{z} \cdot {}_1F_1\left(-\frac{\epsilon - 1}{2}; \frac{3}{2}; z\right) \tag{8}$$

В общем случае ${}_1F_1 \sim e^z$, что соответствует экспоненциально растущей волновой функции и нас не устраивает; поэтому ряд должен обрываться. Имеются две альтернативы:

$$C_1 \neq 0, \quad C_2 = 0, \quad \epsilon = 2n \Rightarrow \boxed{\psi_{2n}(y) ={}_1 F_1(-n; \frac{1}{2}; y^2) \cdot e^{-y^2/2}, \quad E_{2n} = \hbar\omega(2n + \frac{1}{2}),} \tag{9}$$

$$C_1 = 0, \quad C_2 \neq 0, \quad \epsilon = 2n+1 \Rightarrow \boxed{\psi_{2n+1}(y) = y{}_1F_1\left(-n; \frac{3}{2}; y^2\right) e^{-y^2/2}, \quad E_{2n+1} = \hbar\omega(2n + 1 + \frac{1}{2}),} \tag{10}$$

что, конечно, исчерпывает все решения задачи о простом гармоническом осцилляторе. Для справки приведём связь написанных тут гипергеометрических функций с полиномами Эрмита и нормированными волновыми функциями:

$$H_{2n}(y) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!} \cdot {}_1 F_1(-n; \frac{1}{2}; y^2), \quad H_{2n+1}(y) = (-1)^n \frac{(2n+1)!}{n!} 2y \cdot {}_1 F_1(-n; \frac{3}{2}; y^2) s \tag{11}$$

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(y) e^{-y^2/2}, \quad E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{12}$$

Лестничная алгебра

Однако, гораздо более простой способ решения задачи о гармоническом осцилляторе — это через так называемую **алгебру лестничных операторов**. Этот способ универсален, он позволяет решать любые линейные (в смысле линейности, скажем, классических уравнений движения) задачи. Для построения этих операторов полезно решить сперва классическую задачу об осцилляторе, выделив так называемые циклические переменные. Первым делом, однако, предлагается эту задачу обезразмерить, «собрав» из параметров задачи $\hbar$, m, ω параметры масштаба длины и импульса:

$$\hat{X} = \frac{\hat{x}}{\sqrt{\hbar/m\omega}}, \quad \hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{\hbar m\omega}} \tag{13}$$

Какая подстановка чуть меняет коммутационные соотношения $[\hat{X}, \hat{P}] = i$ (поэтому $\hat{P} = -i\frac{\partial}{\partial X}$), и приводит гамильтониан к следующему виду:

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \tag{14}$$

Классические уравнения движения

Забудем на небольшое время о квантовой механике[3], и вспомним, как обстоит жизнь в классической физике. В ней уравнения движения в форме уравнений Гамильтона имеют вид:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H(x,p)}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(x,p)}{\partial x} = -m\omega^2 x \tag{15}$$

Это — система линейных уравнений, и для её решения систему необходимо диагонализовать. Это делается путём введения комплексных координат (естественно, их можно ввести с точностью до произвольной константы C — вообще говоря, комплексной!)

$$a = C(m\omega x + ip) \Rightarrow \frac{da}{dt} = -i\omega a \Rightarrow a(t) = ae^{-i\omega t} \tag{16}$$

$$a^* = C(m\omega \cdot x - ip) \Rightarrow \frac{da}{dt} = i\omega a^* \Rightarrow a^*(t) = a^* e^{i\omega t} \tag{17}$$

[3]Согласно соотношению неопределённости, чтобы забыть о квантовой механике на маленькое время, необходима большая энергия порядка $E \sim \hbar/\Delta t$.

Квантовая механика

В квантовой механике координатам a и a^* соответствует какая-то пара операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^\dagger$. Константу C удобно выбрать так, чтобы операторы получились безразмерными, что соответствует следующему выбору:

$$\boxed{\begin{cases} \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}) & = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p} \\ \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}) & = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - \frac{i}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\hat{p} \end{cases}, \quad \begin{cases} \hat{x} & = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \\ \hat{p} & = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \end{cases}} \tag{18}$$

(выбор фазы остаётся произвольным — скажем, операторы $\hat{a}e^{i\varphi}$ и $\hat{a}^\dagger e^{-i\varphi}$ ничем не хуже). Наконец, можно выразить через эти операторы также и гамильтониан. Тривиальной подстановкой, получаем:

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right) \tag{19}$$

Алгебра лестничных операторов Важнейшую роль в дальнейшем будут играть их коммутационные соотношения; фактически, мы получим полное решение задачи об осцилляторе используя только лишь их:

$$\boxed{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1} \tag{20}$$

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 (а еще это — наш гамильтониан с точностью до константы и множителя). Значит, его собственные состояния образуют базис, в котором мы и будем работать. Эти состояния обозначим следующим образом:
$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\left|\lambda_n\right\rangle = \lambda_n\left|\lambda_n\right\rangle \tag{21}$$
- Несложно проверить, что $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger\hat{a}] = \hat{a}$. Подействовав этим соотношением на $\left|\lambda_n\right\rangle$ и раскрыв явно коммутатор, мы приходим к соотношению
$$\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a}\left|\lambda_n\right\rangle = (\lambda_n - 1)\hat{a}\left|\lambda_n\right\rangle, \tag{22}$$
то есть $\hat{a}\left|\lambda_n\right\rangle$ тоже является собственным для $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ с собственным числом на единицу меньшим, чем у $\left|\lambda_n\right\rangle$:
$$\hat{a}\left|\lambda_n\right\rangle = c_n\left|\lambda_n - 1\right\rangle. \tag{23}$$
Из-за этого условия, оператор $\hat{a}$ называют **понижающим оператором**.
- Константа c_n может быть выбрана вещественной и определяется из условия нормировки
$$\lambda_n = \left\langle\lambda_n\right|\hat{a}^\dagger\hat{a}\left|\lambda_n\right\rangle = c_n^2\left\langle\lambda_n - 1|\lambda_n - 1\right\rangle = c_n^2 \Rightarrow c_n = \sqrt{\lambda_n} \tag{24}$$
- Поскольку спектр оператора $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ обязан быть неотрицательно определённым, то должно быть состояние $\left|\lambda_0\right\rangle$ такое, что $\hat{a}\left|\lambda_0\right\rangle = 0$ (в противном случае, «понижать» можно до бесконечности) — из этого мы заключаем, что $c_0 = \lambda_0 = 0$, а значит $\lambda_n = n$. Таким образом, 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
$$\hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle, \tag{25}$$
и тем самым оператор $\hat{a}^\dagger$ называют **повышающим**.

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

$$\boxed{\begin{cases} \hat{a}^\dagger\hat{a}\left|n\right\rangle & = n\left|n\right\rangle, \quad n = 0, 1, \ldots \\ \hat{a}\left|n\right\rangle & = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle \\ \hat{a}^\dagger\left|n\right\rangle & = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle \end{cases}} \tag{26}$$

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

Приложения к гармоническому осциллятору

Вернёмся к выражению для гамильтониана. После проделанного анализа сразу можно заключить, что у этого гамильтониана имеется дискретный спектр состояний $|n\rangle$; их энергия даётся знаменитой формулой

$$\boxed{E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)} \tag{27}$$

Но на нахождении спектра прелесть этой алгебры не заканчивается; продемонстрируем пару простых приложений. Можно найти, например, 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):

$$\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x} + \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x\right)\psi_0(x) = 0 \Rightarrow \psi_0(x) = \text{const}\cdot\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right). \tag{28}$$

Обратите внимание, что вместо уравнения второго порядка мы получили уравнение первого порядка, решить которое существенно проще. Это вычисление также подтверждает единственность основного состояния и, следовательно, всей последовательности равноотстоящих уровней.

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

$$\hat{x}^2\,|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^2)\,|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\left((2n+1)\,|n\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)}\,|n+2\rangle + \sqrt{n(n-1)}\,|n-2\rangle\right) \tag{29}$$

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

Ремарка о теореме вириала 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 в стационарных состояниях средние значения кинетической и потенциальной энергии совпадают. Это — не случайное совпадение, а является квантомеханическим обобщением классической **теоремы вириала**. Эта теорема гласит, что при движении в потенциале $U(r) \propto r^n$, средние значения кинетической и потенциальной энергии связаны $2\left\langle\hat{T}\right\rangle = n\left\langle\hat{U}\right\rangle$.

Функция Эйри

Функция Эйри возникает буквально при решении уравнения Шрёдингера под действием постоянной силы (в постоянном электрическом поле) — потенциал $U(x) = Fx$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + Fx\psi(x) = E\psi(x) \tag{30}$$

Первым делом, как и раньше, стоит это уравнение обезразмерить. Обратим внимание, что от энергии E можно тривиально избавиться, сделав дополнительную сдвижку начала координат:

$$z = \frac{x - E/F}{(\hbar^2/2mF)^{1/3}}. \tag{31}$$

Такая подстановка приводит уравнение к **уравнению Эйри**:

$$\boxed{\psi''(z) - z\psi(z) = 0.} \tag{32}$$

Его общее решение — произвольная линейная комбинация функций Эйри первого и второго рода:

$$\psi(z) = C_1\text{Ai}(z) + C_2\text{Bi}(z) \tag{33}$$

Следуя общей логике, в классически разрешённой области решения — растущие и затухающие экспоненты. Для квантовой механики наиболее интересно решение с затухающей асимптотикой — собственно, функция Эйри — которая обладает следующей асимптотикой:

$$\boxed{\text{Ai}(z) \approx \begin{cases} \frac{1}{2\sqrt{\pi}}\frac{1}{z^{1/4}}\exp\left(-\frac{2}{3}z^{3/2}\right), & z\to+\infty, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{(-z)^{1/4}}\sin\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & z\to-\infty. \end{cases}} \tag{34}$$

Второе линейно независимое решение выбирается из условия, чтобы на $-\infty$ его асимптотика соответствовала косинусу; при этом, разумеется, на $+\infty$ решение — растущая экспонента[4]:

$$\boxed{\mathrm{Bi}(z) \sim \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{z^{1/4}} \exp\left(\frac{2}{3} z^{3/2}\right), & z \to \infty, \\ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{(-z)^{1/4}} \cos\left(\frac{2}{3}(-z)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right), & z \to -\infty. \end{cases}} \tag{35}$$

Функция Эйри возникает естественным образом при выводе граничных условий для квазиклассического приближения (мы обсудим это в соответствующем семинаре).

Задача

Исследуем движение частицы в потенциале:

$$U(x) = \begin{cases} Fx, & x \geq 0 \\ \infty, & x < 0 \end{cases} \tag{36}$$

Поскольку $U(x \to \pm\infty) \to \infty$, то в задаче присутствует только дискретный спектр. При $x > 0$, уравнение совпадает с уравнением Эйри, в связи с чем его решение даётся $\psi(x) = C \cdot \mathrm{Ai}(z(x))$ (выбрано затухающее при $x \to \infty$ решение), а z определяется (31). Наличие бесконечной означает граничное условие $\psi(0) = 0$, что определяет спектр:

$$\mathrm{Ai}(z_n) = 0, \quad E_n = -z_n(\hbar^2 F^2/2m)^{1/3}.$$

Для справки приведём список первых нулей функции Эйри $z_n = \{-2.33811, -4.08795, -5.52056, \dots\}$. Используя асимптотику для $z \to -\infty$ мы можем получить асимптотику для нулей функции Эйри:

$$\sin\left(\frac{2}{3}(-z_n)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right) = 0 \to z_n \approx -\left(\frac{3\pi}{2}\,(n - 1/4)\right)^{2/3} \tag{37}$$

К примеру по этой формуле получается $z_{10} \approx -12.8281$, что отличается от численного только в 5ой значущей цифре (обратим внимание, что если пренебречь $1/4$ по сравнению с n то для $n = 10$ точность ухудшается в 1000 раз). Для асимптотики уровней получаем:

$$E_n \approx \left(\frac{9\pi^2}{8}\frac{\hbar^2 F^2}{m}\right)^{1/3} n^{2/3} \tag{38}$$

Ремарка о комплексной плоскости Имеется несколько тонкостей, связанных с поведением функции Эйри в комплексной плоскости $z \in \mathbb{C}$. Более подробно эти тонкости будут обсуждаться в следующих семинарах, а пока просто наметим, в чём они заключаются. Кажется естественным, что асимптотические выражения можно аналитически продолжать за пределы вещественной оси. Однако, обратите внимание на то, что асимптотики не представляются однозначными функциями на комплексной плоскости — для их определения требуется проведение разрезов и выделение ветвей. В то же время сама функция Эйри, разумеется, является однозначной. Другой такой тонкостью является то, что, например, функция $\mathrm{Ai}(z)$ на $+\infty$ содержит одну экспоненту, а на $-\infty$ — две (в составе синуса), и одно из другого получить аналитическим продолжением невозможно.

Всё это связано с так называемым **явлением Стокса**. В действительности, асимптотики работают только в определённых секторах комплексной плоскости, разделённых лучами (они называются **линиями Стокса**), на которых коэффициенты перед компонентами асимптотики (одна компонента содержит $\exp\left(\frac{2}{3}y^{3/2}\right)$, другая — $\exp\left(-\frac{2}{3}y^{3/2}\right)$) меняются скачком. На этих линиях выражение в экспоненте является вещественным, так что одна из экспонент является максимально убывающей, а другая — максимально растущей[5]. За этими наблюдениями стоит интересная разработанная наука, с который некоторые из вас ещё столкнутся в процессе обучения.

[4]То, что лишь в одном из четырех мест стоит множитель $1/2\sqrt{\pi}$, а в остальных — $1/\sqrt{\pi}$ не является опечаткой!

[5]На этих линиях погрешность растущей асимптотики сравнивается по порядку величины с затухающей экспонентой. Скачок в коэффициентах перед экспонентами компенсирует скачок в поправке к растущей экспоненте, так что суммарное выражение остаётся регулярным, как и должно быть.