Метод факторизации для решения уравнения Шредингера

$$\hat{D} = \frac{d}{dx}$$

Пусть имеем уравнение с постоянными коэффициентами:

$$(a_n \hat{D}^n + a_{n-1}\hat{D}^{n-1} + \dots + a_1 \hat{D} + a_0) y(x) = 0.$$

Его можно переписать в виде:

$$a_n \left[(\hat{D} - r_n)(\hat{D} - r_{n-1}) \cdots (\hat{D} - r_1)\right] y(x) = 0,$$

где r_i - корни характеристического ур-я.

n независимых решений нашего диф-ура получаются из $(\hat{D} - r_i) y_i(x) = 0$.

$$y(x) = \sum_{i=1}^{n} C_i e^{-r_i x}.$$

Особый случай – кратные корни.

Тривиальный пример – частица в бесконечной яме:

$$\psi'' + k^2 \psi = 0.$$

$$(\hat{D}^2 + k^2)\psi = 0. \qquad r_1 = ik, \quad r_2 = -ik$$

$$\psi = C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}.$$

Факторизация в случае гарм. осциллятора

$$\hat{H}\psi = \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right)\psi = E\psi.$$

Здесь, увы, коэффициенты <u>не постоянны</u>

Но, тем не менее, факторизация возможна и <u>очень</u> полезна.

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

годится для чисел. Для операторов – сложнее.

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\frac{\hat{p}^2}{2m\hbar\omega} + \frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$ – из соображений размерности выделили $\hbar\omega$.

Вводим $\hat{A}$ и $\hat{A}^+$:

$$\hat{A} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}, \quad \hat{A}^+ = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x - i\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}.$$

Они не эрмитовы, им не соответствуют никакие наблюдаемые. Кроме того, они не коммутируют.

$$[A\hat{A}^+] = \frac{i}{2\hbar}\left\{-[x,\hat{p}] + [\hat{p},x]\right\} = 1.$$

Значит,
$$\hat{A}^+\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^+ - 1.$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{A} + \hat{A}^+\right); \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\left(\hat{A}^+ - \hat{A}\right).$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{A}^+\hat{A} + \hat{A}\hat{A}^+\right) = \hbar\omega\left(\hat{A}^+A + \frac{1}{2}\right) =$$

$= \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$. $\hat{N}$ – number operator $= \hat{A}^+\hat{A}$.

Полной факторизации не вышло, путается 1/2.

Но, вместо задачи о собственных функциях и собственных значениях $\hat{H}$ мы можем искать собственные состояния оператора $\hat{N}$ (который <u>да</u>, факторизован).

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle .$$

Мы, пока, конечно не можем утверждать, что собственные числа оператора $\hat{N}$ целые и неотрицательные, но уже знаем, что они реальные, ибо $\hat{N}=\hat{A}^{+}\hat{A}$ – эрмитов.

Замечаем, что

$$\hat{N}\left(\hat{A}|n\rangle\right) = \left(\hat{A}^{+}\hat{A}\right)\left(\hat{A}|n\rangle\right) = \left(\hat{A}\hat{A}^{+}-1\right)\left(\hat{A}|n\rangle\right) =$$

$$= \hat{A}\left(\hat{N}|n\rangle\right) - \hat{A}n\rangle = (n-1)\left(\hat{A}|n\rangle\right).$$

Это значит, что если $|n\rangle$ – собственное для $\hat{N}$, то $\hat{A}|n\rangle$ – тоже собственное с $(n-1)$ в качестве собств. значение.

Оператор $\hat{A}$ – оператор понижения n на единицу.

Точно так же,

$$\hat{N}\left(\hat{A}^{+}|n\rangle\right) = (n+1)\,\hat{A}^{+}|n\rangle ,$$

т.е. оператор $\hat{A}^{+}$ – оператор повышения n.

Далее, n всегда $\geqslant 0$. Действительно,

$$0 \leqslant \langle \hat{A}n | \hat{A}n \rangle = \langle n | \hat{A}^{+}\hat{A} | n \rangle = \langle n | \hat{N} | n \rangle = n .$$

Значит имеется n_{min}.

Далее, $\hat{A}|n_{min}\rangle \sim |n_{min}-1\rangle = 0$.

$$\hat{N}\cdot|n_{min}\rangle = n_{min} = \left(\hat{A}^{+}\hat{A}\right)|n_{min}\rangle = 0.$$

$$n_{min}=0,$$

и далее, действуя оператором $\hat{A}^{+}$ n раз на $|n_{min}\rangle$ получаем все состояния с целыми n.

$$\hat{H}\,|n\rangle = \hbar\omega\left(n+\tfrac{1}{2}\right)|n\rangle, \quad n=0,1,2\ldots$$

$$|n\rangle \sim \left(\hat{A}^{+}\right)^{n}|0\rangle.$$

Последнее равенство дает возможность явно найти все волновые функции состояний $|n\rangle$. Сначала найдем $|0\rangle$:

$$0 = \hat{A}\cdot\Psi_0(x) = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + i\,\frac{\hat{p}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right)\Psi_0(x).$$

$$\frac{d\Psi_0}{dx} = -x\cdot\frac{m\omega}{\hbar}\Psi_0(x),$$

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\rho\sqrt{\pi}}}\exp\left(-\frac{x^2}{2\rho^2}\right), \quad \rho^2 = \frac{\hbar}{m\omega}$$

$|n\rangle = C_n\left(\hat{A}^{+}\right)^{n}|0\rangle$, C_n – нормировочная константа.

$$n = \langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\left(\hat{A}\hat{A}^{+}-1\right)|n\rangle = \langle n|\hat{A}\hat{A}^{+}|n\rangle - 1$$

$$n+1 = \langle n|\hat{A}\hat{A}^{+}|n\rangle = \langle A^{+}n|A^{+}n\rangle$$

Значит, A^{+} переводит $|n\rangle$ в $|n+1\rangle$, но с увеличенной нормой в $(n+1)$ раз, а значит создает $\sqrt{n+1}\cdot\Psi_{n+1}$.

$$\hat{A}^{+}|n\rangle = |n+1\rangle\cdot\sqrt{n+1}.$$

$$\hat{A}\,|n\rangle = \sqrt{n}\cdot|n-1\rangle.$$

Операторы рождения и уничтожения.

Колебания электромагнитного поля можно представить как колебания ансамбля гармонических осцилляторов, где амплитуды есть пространственные Фурье компоненты векторного потенциала. Аналогия может быть продвинута дальше, если мы обобщим операторы повышения и понижения

$$\hat{a}_{\vec{k}} \text{ и } \hat{a}^{+}_{\vec{k}}$$

для каждого волнового вектора $\vec{k}$.

Операторы с разными $\vec{k}$ не зависимы, и они коммутируют друг с другом, а с одним и тем же $\vec{k}$ – как в одном осцилляторе.

Итак, имеем

$$[\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}^{+}_{\vec{k}'}] = \delta_{\vec{k},\vec{k}'}, \quad [\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{k}'}] = 0; \quad [\hat{a}^{+}_{\vec{k}} \hat{a}^{+}_{\vec{k}'}] = 0.$$

Для каждой моды есть оператор $\hat{N}_{\vec{k}} = \hat{a}^{+}_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}$

Гамильтониан $\quad \hat{H} = \sum_{\vec{k}} \hat{H}_{\vec{k}}, \quad \hat{H}_{\vec{k}} = \hbar\omega_{k}(\hat{N}_{\vec{k}} + \frac{1}{2}).$

$$\hat{a}^{+}_{\vec{k}} |n_{\vec{k}}\rangle = \sqrt{n_{\vec{k}}+1}\, |n_{\vec{k}}+1\rangle, \quad \hat{a}_{\vec{k}} |n_{\vec{k}}\rangle = \sqrt{n_{\vec{k}}}\, |n_{\vec{k}}-1\rangle.$$

Оператор $\hat{a}^{+}_{k}$ увеличивает энергию системы на $\hbar\omega_{\vec{k}}$, где $\omega_{\vec{k}} = c|\vec{k}|$.

Отсюда интерпретация – квантование электромагнитного поля.

1) $|0\rangle$ - вакуум.
2) $\hat{a}^{+}_{k}$ - рождает одну частицу-фотон с энергией $\hbar\omega_{\vec{k}}$ и импульсом $\hbar\vec{k}$, а $\hat{a}_{\vec{k}}$ - убивает. Соответственно $\hat{a}^{+}_{k}$ - оператор рождения, $\hat{a}_{\vec{k}}$ - уничтожения.

Квантовая теория поля распространяется на все виды частиц. Для всех бозонов – как для фотонов.

Для фермионов – иначе.

Важно:

антикоммутационные свойства фермионных операторов приводят к антисимметрии волновых функций относительно перестановки частиц 1 и 2:

$$|1, 2\rangle = \hat{b}_1^+ \hat{b}_2^+ |0\rangle = - \hat{b}_2^+ \hat{b}_1^+ |0\rangle = - |2, 1\rangle.$$
