

КОГЕРЕНТНІ СТАНИ ГАРМОНІЧНОГО ОСЦИЛЯТОРА

Гармонічний осцилятор. Розв'язок методом факторизації

Задача про малі коливання – найважливіша задача фізики. Практично у всіх розділах теоретичної фізики є така задача. В електродинаміці поле електромагнітної хвилі можна розкласти на незалежні гармонічні осцилятори (виникає поняття фотона, кванта електромагнітного поля). У фізиці твердого тіла теплові коливання кристала розглядають як коливання набору гармонічних осциляторів і вводять поняття фонона – кванта коливань і т.д.

Повернемося до задачі про гармонічний (лінійний) осцилятор з гамільтоніаном

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}; \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}; \quad \hat{x} = x.$$

і розв'яжемо задачу методом, який називається «методом факторизації». Виконуємо перетворення, які дозволять діагоналізувати гамільтоніан осцилятора:

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

Вводимо безрозмірні координати та імпульси

$$\begin{aligned} \hat{Q} &= \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x}; \quad \hat{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \hat{p}; \quad \hat{P} = -i \frac{d}{dQ}; \\ \hat{H} &= \frac{1}{2}\hbar\omega (\hat{P}^2 + \hat{Q}^2) = \left(\frac{1}{2}\hbar\omega \right) \frac{1}{2} [(\hat{Q} + i\hat{P})(\hat{Q} - i\hat{P}) + (\hat{Q} - i\hat{P})(\hat{Q} + i\hat{P})]; \\ [\hat{Q}, \hat{P}] &= i. \end{aligned}$$

Вводимо нові оператори (це лінійні комбінації оператора координати й імпульсу)

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} + i\hat{P}); \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q} - i\hat{P}).$$

Правила комутації для нових (неермітових операторів)

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \frac{1}{2} [\hat{Q} + i\hat{P}, \hat{Q} - i\hat{P}] = 1.$$

У термінах операторів $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$ гамільтоніан осцилятора запишеться у вигляді

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \omega (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger); \quad \hat{a} \hat{a}^\dagger = 1 + \hat{a}^\dagger \hat{a};$$

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

Оператор $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ – ермитов. Введемо для нього позначення $\hat{n} = \hat{a}^\dagger \hat{a}$

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

Вирішуємо РШ у безрозмірних одиницях, використавши запис гамільтоніана через $\hat{a}^\dagger, \hat{a}$

$$\hat{h} \psi_\varepsilon = \varepsilon \psi_\varepsilon; \quad \hat{h} = \frac{\hat{H}}{\hbar \omega}; \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar \omega}.$$

Знайдемо наступні комутатори

$$\begin{aligned} [\hat{h}, \hat{a}^\dagger] &= [\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger; \\ [\hat{h}, \hat{a}] &= [\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2, \hat{a}] = -\hat{a}; \end{aligned}$$

За допомогою операторів $\hat{a}^\dagger, \hat{a}$ можна будувати ВФ гамільтоніана $\hat{h}$

$$\begin{aligned} \hat{h} \hat{a}^\dagger \psi_\varepsilon &= (\hat{a}^\dagger \hat{h} + \hat{a}^\dagger) \psi_\varepsilon = \hat{a}^\dagger (\hat{h} + 1) \psi_\varepsilon = \hat{a}^\dagger (\varepsilon + 1) \psi_\varepsilon = (\varepsilon + 1) \hat{a}^\dagger \psi_\varepsilon; \\ \hat{h} \hat{a} \psi_\varepsilon &= (\hat{a} \hat{h} - \hat{a}) \psi_\varepsilon = \hat{a} (\hat{h} - 1) \psi_\varepsilon = \hat{a} (\varepsilon - 1) \psi_\varepsilon = (\varepsilon - 1) \hat{a} \psi_\varepsilon; \\ \psi_{\varepsilon+1} &\sim \hat{a}^\dagger \psi_\varepsilon; \quad \psi_{\varepsilon-1} \sim \hat{a} \psi_\varepsilon. \end{aligned}$$

$\psi_{\varepsilon+1}$ і $\psi_{\varepsilon-1}$ – ВФ гамільтоніана h з ВЗ $\varepsilon \pm 1$ відповідно. Сусідні ВЗ відрізняються на одиницю. Оператор $\hat{a}^\dagger$ збільшує ВЗ на 1, а оператор $\hat{a}$ зменшує ВЗ на 1. З урахуванням нормування

$$\hat{a}^\dagger \psi_\varepsilon = A \psi_{\varepsilon+1}; \quad \hat{a} \psi_\varepsilon = B \psi_{\varepsilon-1};$$

Шукаємо нормувальні константи A й B .

$$(\hat{a}^\dagger \psi_\varepsilon, \hat{a}^\dagger \psi_\varepsilon) = |A|^2 (\psi_{\varepsilon+1}, \psi_{\varepsilon+1}) = |A|^2.$$

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{h} - \frac{1}{2}; \quad \hat{a} \hat{a}^\dagger = \hat{h} + \frac{1}{2}; \quad \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} = 1;$$

$$(\hat{a}^\dagger \psi_\varepsilon, \hat{a}^\dagger \psi_\varepsilon) = (\psi_\varepsilon, \hat{a} \hat{a}^\dagger \psi_\varepsilon) = \left(\psi_\varepsilon, \left(\hat{h} + \frac{1}{2} \right) \psi_\varepsilon \right) = \left(\varepsilon + \frac{1}{2} \right) (\psi_\varepsilon, \psi_\varepsilon) = \left(\varepsilon + \frac{1}{2} \right);$$

$$|A|^2 = \left(\varepsilon + \frac{1}{2} \right); \quad A = \sqrt{\left(\varepsilon + \frac{1}{2} \right)};$$

Аналогічно:

$$(\hat{a} \psi_\varepsilon, \hat{a} \psi_\varepsilon) = |B|^2 (\psi_{\varepsilon-1}, \psi_{\varepsilon-1}) = |B|^2.$$

$$\hat{a}^\dagger \hat{a} = \hat{h} - \frac{1}{2}; \quad \hat{a} \hat{a}^\dagger = \hat{h} + \frac{1}{2}; \quad \hat{a} \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger \hat{a} = 1;$$

$$(\psi_\varepsilon, \hat{a}^\dagger \hat{a} \psi_\varepsilon) = \left(\psi_\varepsilon, \left(\hat{h} - \frac{1}{2} \right) \psi_\varepsilon \right) = \left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right) (\psi_\varepsilon, \psi_\varepsilon) = \left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right);$$

$$|B|^2 = \left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right); \quad B = \sqrt{\left(\varepsilon - \frac{1}{2} \right)}.$$

$$\text{Отримали: } \hat{a}^\dagger \psi_\varepsilon = \sqrt{\varepsilon + 1/2} \psi_{\varepsilon+1}, \quad \hat{a} \psi_\varepsilon = \sqrt{\varepsilon - 1/2} \psi_{\varepsilon-1}$$

Знайдемо рівень із найменшою енергією (ground state – основний стан)

$$\hat{h} \psi_0 = \varepsilon_0 \psi_0.$$

Дія оператора $\hat{a}$ на ХФ основного стану ψ_0 , очевидно,

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

$$\left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \psi_0 = \frac{1}{2} \psi_0; \quad \varepsilon_0 = \frac{1}{2};$$

Енергія основного стану

$$E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}.$$

Енергія кожного наступного стану відрізняється від енергії попереднього стану на одиницю

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_0 + 1; \quad \varepsilon_2 = \varepsilon_1 + 1 = \varepsilon_0 + 2; \quad \varepsilon_3 = \varepsilon_2 + 1 = \varepsilon_0 + 3; \dots$$

$$\varepsilon_n = \varepsilon_0 + n = n + \frac{1}{2}; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Знайдемо ХФ основного стану (це ХФ оператора $\hat{a}$ зі ВЗ рівним нулю)

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(Q + \frac{d}{dQ} \right) \psi_0 = 0;$$

$$\frac{d\psi_0}{dQ} = -Q\psi_0; \quad \frac{d\psi_0}{\psi_0} = -QdQ; \quad \ln \psi_0 = \ln C - \frac{Q^2}{2}; \quad \psi_0 = Ce^{-\frac{Q^2}{2}}.$$

Нормуємо на одиницю (для довідки): $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}.$)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0|^2 dQ = 1; \quad |C|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{Q^2}{2}} dQ = 1; \quad |C|^2 \sqrt{\pi} = 1; \quad C = \frac{1}{\pi^{1/4}};$$

$$\psi_0 = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{Q^2}{2}}; \quad Q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x.$$

ХФ збуджених станів одержимо за допомогою оператора $\hat{a}^\dagger$:

$$a^\dagger \psi_n = \sqrt{(\varepsilon_n + 1/2)} \psi_{n+1} = \sqrt{n+1} \psi_{n+1};$$

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger \psi_{n-1} = \dots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \psi_0;$$

$$\psi_n(Q) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(Q - \frac{d}{dQ} \right)^n \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\pi 2^n n!}} \left(Q - \frac{d}{dQ} \right)^n e^{-\frac{Q^2}{2}};$$

$$\left(Q - \frac{d}{dQ} \right)^n e^{-\frac{Q^2}{2}} = (-1)^n e^{\frac{Q^2}{2}} \frac{d^n}{dQ^n} (e^{-Q^2}) = e^{-\frac{Q^2}{2}} H_n(Q)$$

Зображення чисел заповнення:

$$a^\dagger \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1};$$

$$a \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}.$$

Залишимо в записі ХФ тільки номер рівня (це кількість квазічастинок із даною енергією)

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

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle.$$

$H_n(Q)$ – поліноми Ерміта. Оператори $\hat{a}^{\dagger}, \hat{a}$ називають операторами народження й знищення (creation and annihilation). Оператор $\hat{n} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ – оператор числа частинок. Його власні значення $n = 0, 1, 2, \dots$

Когерентні стани осцилятора

Легко перевірити, що в основному стані гармонічного осцилятора відповідає мінімально можливий добуток невизначеностей

$$\overline{\Delta x^2} \cdot \overline{\Delta p^2} = \frac{\hbar^2}{4}.$$

Виявляється, що можна побудувати ХФ більш загального виду, для якої виконується така ж рівність. Такі стани називаються когерентними. Це ВФ оператора знищення

$$\hat{a}\psi_{\alpha} = \alpha\psi_{\alpha},$$

де α ВЗ оператора знищення. α – будь-яке комплексне число, тому що оператор знищення неермітів (в оператора народження немає ні ВФ, ні ВЗ).

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(Q + \frac{d}{dQ}\right)\psi = \alpha\psi; \quad \frac{d\psi}{dQ} = (-Q + \sqrt{2}\alpha)\psi; \quad \frac{d\psi}{d\psi} = (-Q + \sqrt{2}\alpha)dQ;$$

$$\psi_{\alpha} = Ce^{-\frac{Q^2}{2} + \sqrt{2}\alpha Q} = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{\frac{\alpha^2 - |\alpha|^2}{2}} e^{-\frac{1}{2}(Q - \sqrt{2}\alpha)^2}.$$

ХФ когерентних станів можна зв'язати зі СФ осцилятора (довгий висновок опускаємо)

$$\psi_{\alpha}(Q) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \psi_n(Q).$$

ХФ когерентних станів не є ортогональними (можна перевірити). Для таких станів (приводимо теж без доказу) виконується умова мінімуму добутку невизначеностей

РІВНЯННЯ ШРЕДІНГЕРА У МАГНІТНОМУ ПОЛІ

З електродинаміки відомо, що орбітальному механічному моменту $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ відповідає магнітний момент $\vec{\mu}_L = (e/2mc)\vec{L}$. За правилом відповідності введемо орбітальний магнітний момент у квантовій механіці як

$$\vec{\mu}_L = (e/2mc)\hat{\vec{L}} = (e\hbar/2mc)\hat{\vec{L}}.$$

У квантовій механіці кожна елементарна частинка має також власний механічний момент – **спін**. Із власним механічним моментом зв'язаний власний магнітний момент частинки

$$\hat{\vec{\mu}}_s = \frac{\mu}{s}\hat{\vec{S}},$$

де $\hat{\vec{S}}$ – спін частинки, μ – характерна для частинки стала. Спін буває цілий та напівцілий, а його проекція приймає $2s+1$ значення від $-s$ до $+s$. З релятивістського рівняння Дірака (узагальнення РШ на релятивістський випадок) випливає, що відношення спінового магнітного моменту до спінового механічного моменту рівно

$$\frac{\mu}{\hbar c} = -\frac{|e|}{mc}, \quad s = \frac{1}{2}, \quad -\mu = \mu_B = \frac{|e|\hbar}{2mc} = 0.927 \cdot 10^{-20} \frac{\text{эрг}}{\text{гаусс}}.$$

Зв'язок спінових моментів для електрона

$$\begin{aligned} \hat{\vec{\mu}}_s &= -2\mu_B\hat{\vec{S}} = 2\mu\hat{\vec{S}}, \quad \mu < 0; \\ \hat{\vec{\mu}}_j &= \mu(\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}}); \quad \hat{\vec{j}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}. \end{aligned}$$

З експериментальних даних випливає, що в протона спіновий і магнітний моменти паралельні, а в нейтрона антипаралельні:

$$\mu_{\text{протона}} = 2.79\mu_{\text{яд.}}; \quad \mu_{\text{нейтрона}} = 1.91\mu_{\text{яд.}}; \quad \mu_{\text{яд.}} = \frac{e\hbar}{2m_p c}.$$

Перетворимо за правилом відповідності функцію Гамільтона для нерелятивістського заряду в електромагнітному полі в оператор Гамільтона (поставимо «капелюшка», де це потрібно)

$$\vec{A} = (0, xH, 0) \quad H = \frac{1}{2m} \left(\hat{\vec{p}} - \frac{e}{c}\vec{A} \right)^2 + e\varphi - \hat{\vec{\mu}}_s \vec{H}.$$

Записаний гамільтоніан Паулі для частинки, який має спін 1/2. В.Паулі запропонував цей гамільтоніан в 1926 році для частинки зі спіном 1/2, просто

додавши в гамільтоніан такий же доданок, як у класичній електродинаміці для взаємодії магнітного моменту із зовнішнім магнітним полем.

Рух електрона в однорідному постійному магнітному полі. Рівні Ландау (1930).

Нехай магнітне поле паралельне осі z $\vec{H} \parallel OZ$. Використовуємо запропоноване Ландау калібрування векторного потенціалу $\vec{A} = (0, xH, 0)$:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{p}_x^2 + \left(p_y - \frac{eH}{c} x \right)^2 + p_z^2 \right] - 2\mu_B H S^z; \quad S^z = \pm \frac{1}{2}.$$

Добавка, зв'язана зі спіновим магнітним моментом, комутирує з доданками у квадратних дужках і дає внесок у рівні енергії $\pm \mu_B H$. Її ми відкинемо та розглянемо гамільтоніан

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\hat{p}_x^2 + \left(\hat{p}_y - \frac{eH}{c} \hat{x} \right)^2 + \hat{p}_z^2 \right].$$

Це й будуть рівні Ландау. Задача зводиться знаходження енергетичних рівнів та ХФ лінійного осцилятора. Рівні енергії квантуються в напрямку, перпендикулярному магнітному полю. Координати x і z не входять у гамільтоніан, тому розв'язок можемо шукати у вигляді

$$\psi(x, y, z) = \exp \left[\frac{i(p_y y + p_z z)}{\hbar} \right] \psi(x).$$

Енергії

$$E_{np_z} = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{p_z^2}{2m}; \quad \omega = \frac{eH}{mc}.$$

Частота ω – це кругова частота для обертання класичного електрона в магнітному полі. Хвильова функція $\psi_{n,p_y,p_z} = \exp \left[\frac{i(p_y y + p_z z)}{\hbar} \right] \psi_n(x)$ залежить від трьох квантових чисел, а енергія – від двох. Рівні Ландау вироджені по квантовому числу p_y . Кратність виродження залежить від величини магнітного поля.