Классический осциллятор как квантовый

На примере гармонического осциллятора покажем, что обычный пружинный маятник может быть описан с точки зрения квантовой механики и полученные при этом результаты будут совпадать с классическими.

В квантовой механике для описания осциллятора используется волновая функция Ψ, подчиняющаяся волновому уравнению:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi,$$

где

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{k\hat{x}^2}{2}$$

называется гамильтонианом нашего осциллятора. Операторы имеют различный вид в зависимости от представления. Рассмотрим координатное представление, в котором

$$\hat{x} = x, \quad \hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}.$$

В нём волновое уравнение примет вид

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{kx^2}{2}\right)\Psi(x,t).$$

Это уравнение можно решить методом разделения переменных:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right),$$

где функция $\psi(x)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$-\frac{h^2}{2m}\psi'' + \left(\frac{kx^2}{2} - E\right)\psi = 0.$$

Немного преобразуем его:

$$\psi'' - \left(\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 - \frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi = 0.$$

Перейдём к безразмерной переменной

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

относительно которой уравнение примет вид

$$\psi'' - \left(y^2 - \frac{2E}{\hbar\omega}\right)\psi = 0.$$

Выполним ещё одну подстановку:

$$\psi(y) = u(y)\exp(-y^2/2),$$

$$u'' - 2yu' - (1 - y^2)u - (y^2 - \lambda)u = 0,$$

$$u'' - 2yu' + (\lambda - 1)u = 0.$$

Это уравнение полиномов Эрмита, если положить $\lambda - 1 = 2n$. Таким образом, энергия осциллятора может принимать только значения

$$E_n = \frac{\hbar\omega}{2} + n\hbar\omega,\ n = 0, 1, 2, \ldots$$

а волновая функция при этом будет иметь вид

$$\Psi_n(x,t) = C\tilde{H}_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right)\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}t\right),$$

где $\tilde{H}_n$ – нормированные многочлены Эрмита, а C – нормировочный коэффициент, который определяется из условия нормировки

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^\star \Psi_n \, dx = 1 \Rightarrow C = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar}}.$$

Найденные нами состояния характеризуются неизменным во времени значением энергии. Такие состояния называются стационарными. Посмотрим, как в таких состояниях меняется положение маятника:

$$\langle x_n(t) \rangle = \langle \Psi_n | x | \Psi_n \rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \Psi_n^\star x \Psi_n \, dx = 0.$$

То есть маятник, обладая некоторой энергией, находится в положении равновесия. Тут мы видим некоторое расхождение с поведением обычного маятника. Но это расхождение довольно легко объясняется: для возбуждения стационарного состояния осциллятору нужно передать энергию, равную энергии этого состояния, что в случае маятника невозможно сделать ввиду малой разности между уровнями.

Чтобы с этой точки зрения объяснить поведение обычного маятника, требуется возбудить сразу несколько стационарных состояний:

$$\Psi = \sum c_n \Psi_n, \quad \sum |c_n|^2 = 1.$$

Энергия такого состояния

$$E = \sum c_m^\star c_n \langle \Psi_m | \hat{H} | \Psi_n \rangle = \sum c_m^\star c_n E_n \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = |c_n|^2 E_n,$$

а координата будет изменяться следующим образом:

$$x(t) = \sum c_m^\star c_n \langle \Psi_m | x | \Psi_n \rangle = C^2 \sum c_m^\star c_n \langle \tilde{H}_m(y) | x e^{-y^2} | \tilde{H}_n(y) \rangle \exp\left(-i \frac{E_n - E_m}{\hbar} t \right).$$

Рассмотрим подробнее величину

$$\langle \tilde{H}_m(y) | x e^{-y^2} | \tilde{H}_n(y) \rangle = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} \tilde{H}_m^\star(y) x \tilde{H}_n(y) \, dx = \frac{\hbar}{m\omega} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} y \tilde{H}_m(y) \tilde{H}_n(y) \, dy.$$

Так как многочлены Эрмита $\tilde{H}_m(y)$ ортогональны на действительной прямой с весом e^{-y^2}, то это скалярное произведение будет отлично от нуля только в случае $|n - m| = 1$:

$$\langle \tilde{H}_m(y)|xe^{-y^2}|\tilde{H}_n(y)\rangle = \frac{\hbar}{m\omega}(a_n\delta_{n,m+1} + a_m\delta_{m,n+1}),$$

где

$$a_n = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2} y\tilde{H}_n(y)\tilde{H}_{n-1}(y)\,dy = \sqrt{\frac{n}{2}}.$$

Возвращаясь, получаем

$$x(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sum c_m^\star c_n(a_n\delta_{n,m+1} + a_m\delta_{m,n+1}) \exp(-i(n-m)\omega t),$$

$$x(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \sum a_n(c_n c_{n-1}^\star e^{-i\omega t} + c_{n-1}c_n^\star e^{i\omega t}) = 2\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} S\cos(\omega t + \phi_0),$$

где

$$S = \left|\sum a_n c_n^\star c_{n-1}\right|, \quad \phi_0 = \arg \sum a_n c_n^\star c_{n-1}.$$

Пусть энергия осциллятора равна E и она находится вблизи уровня $E_n = \hbar\omega(n+1/2)$. Положим, что коэффициенты состояний с близкими к среднему значению энергиями много больше остальных. Пусть вблизи состояния с номером n заметные амплитуды имеют $2n_1$ состояний, причём $n \gg n_1 \gg 1$ и $c_{n-n_1} \approx \ldots \approx c_n \approx \ldots \approx c_{n+n_1}$. Тогда

$$\sum_{m=n-n_1}^{n+n_1} c_m^\star c_m \approx 1,$$

$$S \approx \left|\sum_{m=n-n_1+1}^{n+n_1} a_m c_m^\star c_{m-1}\right| \approx \left|\sum_{m=n-n_1+1}^{n+n_1} \sqrt{\frac{m}{2}} c_m c_m^\star\right| \approx \sqrt{\frac{n}{2}}.$$

Амплитуда колебаний получается равной

$$A = 2\sqrt{\frac{n\hbar\omega}{2m\omega^2}} = 2\sqrt{\frac{E}{2k}},$$

откуда получается классическое

$$E = \frac{kA^2}{2}.$$

Таким образом, энергия колебаний маятника связана с их амплитудой знакомой со школы формулой.