ГЛАВА XII
ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

§ 1. Введение

В классической механике гармонический осциллятор — это частица, способная перемещаться вдоль некоторой оси и подверженная действию возвращающей силы, пропорциональной расстоянию частицы от начала координат. Решение этой задачи хорошо известно. Пусть q — координата положения частицы на оси, p — её импульс, m — масса, $-m\omega^2 q$ — возвращающая сила. Уравнения движения частицы выводятся из функции Гамильтона $(p^2+m^2\omega^2q^2)/2m$; легко показать, что частица синусоидально колеблется с (круговой) частотой ω около начала координат.

Соответствующая квантовая задача формулируется как задача об одномерной частице с массой m и с гамильтонианом

$$\mathcal{H}=\frac{1}{2m}(p^2+m^2\omega^2q^2), \tag{1}$$

причем переменные положения q и импульса p связаны соотношением коммутации

$$[q, p]=i\hbar. \tag{2}$$

Здесь мы имеем дело с очень простой квантовой системой, уравнение Шредингера которой может быть точно решено; система обладает целым рядом замечательных свойств.

Исследование гармонического осциллятора имеет большое значение в квантовой теории, так как гамильтониан типа (1) встречается во всех задачах, где имеют место квантованные колебания: мы находим его в квантовой электродинамике и квантовой теории поля, в теории молекулярных и кристаллических колебаний. С другой стороны, проблемы, относящиеся к гармоническому осциллятору, служат прекрасной иллюстрацией основных принципов и формализма квантовой теории. Поэтому вполне оправдано подробное изучение этой задачи, которому и посвящена данная глава.

Два первых раздела посвящены одномерному осциллятору. Общее решение проблемы собственных значений гамильтониана содержится в разделе I. Раздел II посвящен различным приложениям: нахождению производящей функции стационарных состояний, решению уравнений движения Гейзенберга, сравнению квантового и классического осцилляторов и изучению движения волнового пакета — что дает хорошую иллюстрацию как принципа соответствия, так и соотношений неопределенности — и, наконец, исследованию свойств ансамбля гармонических осцилляторов в термодинамическом равновесии.

В разделе III рассматривается гармонический осциллятор в нескольких измерениях. Основной характеристикой этой задачи является наличие вырожденных собственных значений. Следствия вырождения детально изучаются в двух частных случаях изотропного осциллятора в двух и трех измерениях.

Раздел I. СОБСТВЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ И СОБСТВЕННЫЕ ВЕКТОРЫ ГАМИЛЬТОНИАНА

§ 2. Проблема собственных значений

Чтобы не загромождать вычисления ненужными постоянными, положим

$$\mathscr{H} = H\hbar\omega, \tag{3}$$

$$q = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2} Q, \tag{4}$$

$$p = (m\hbar\omega)^{1/2} P. \tag{5}$$

Проблема состоит в нахождении собственных значений и построении собственных векторов оператора

$$H = \frac{1}{2}(P^2 + Q^2), \tag{6}$$

где эрмитовы операторы P и Q удовлетворяют коммутационному соотношению

$$[Q, P] = i. \tag{7}$$

Чтобы решить эту задачу, можно выбрать некоторое представление, например, $\{Q\}$, и решить уравнение Шредингера в этом представлении. Поскольку в $\{Q\}$-представлении P выражается дифференциальным оператором $(-id/dQ)$, мы приходим к одномерному уравнению Шредингера

$$\frac{1}{2}\left[-\frac{d^2}{dQ^2} + Q^2\right] u(Q) = \varepsilon u(Q). \tag{8}$$

Мы воспользуемся более прямым методом, принадлежащим Дираку; построим собственные векторы H, действуя на один из них соответствующими операторами. Этот метод дает возможность решить задачу на собственные значения в общем виде без ссылок на какое-либо конкретное представление, основываясь исключительно на основных постулатах пространства Гильберта и коммутационном соотношении (7). Его можно рассматривать как метод построения векторного пространства $\mathscr{E}$ динамических состояний системы, подобный описанному в § VIII. 6.

§ 3. Введение операторов a, $a^{\dagger}$ и N

Определим операторы a и $a^{\dagger}$ формулами

$$a = \frac{\sqrt{2}}{2}(Q + iP), \tag{9а}$$

$$a^{\dagger} = \frac{\sqrt{2}}{2}(Q - iP), \tag{9б}$$

операторы a и $a^{\dagger}$ эрмитово сопряжены друг другу. Соотношение коммутации (7) эквивалентно соотношению

$$[a, a^{\dagger}] = 1. \tag{10}$$

Если в определении (6) выразить Q и P через a и $a^{\dagger}$, то получим

$$H = \frac{1}{2}(aa^{\dagger} + a^{\dagger}a). \tag{11}$$

Положим

$$N = a^{\dagger}a, \tag{12}$$

тогда из (10) и (11) находим

$$H = N + 1/2. \tag{13}$$

Из уравнений (10) и (12) получаем важные соотношения:

$$Na = a(N - 1), \tag{14а}$$

$$Na^{\dagger} = a^{\dagger}(N + 1). \tag{14б}$$

Задача на собственные значения, которую мы решаем, эквивалентна задаче построения собственных векторов оператора N, определенного формулой (12), причем операторы a и $a^{\dagger}$ эрмитово сопряжены друг другу и удовлетворяют условию (10).

Докажем основную теорему.

Если $|\nu\rangle$ *есть собственный вектор оператора* N, а ν — *соответствующее собственное значение, то*

а) $\nu \geqslant 0$;

б) *если* $\nu = 0$, *то* $a|\nu\rangle = 0$, *в остальных же случаях* $a|\nu\rangle$ *есть отличный от нуля вектор с нормой*

$$\nu\langle\nu|\nu\rangle,$$

причем это собственный вектор оператора N, принадлежащий собственному значению $\nu - 1$;

в) *вектор $a^\dagger|\nu\rangle$ отличен от нуля, его норма равна*

$$(\nu + 1)\langle\nu|\nu\rangle,$$

причем это собственный вектор оператора N, принадлежащий собственному значению $\nu + 1$.

По предположению

$$N|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle, \quad \langle\nu|\nu\rangle > 0.$$

Пользуясь определением (12) и коммутационным соотношением (10), находим нормы векторов $a|\nu\rangle$ и $a^\dagger|\nu\rangle$:

$$\langle\nu|a^\dagger a|\nu\rangle = \langle\nu|N|\nu\rangle = \nu\langle\nu|\nu\rangle, \tag{15а}$$

$$\langle\nu|aa^\dagger|\nu\rangle = \langle\nu|(N+1)|\nu\rangle = (\nu+1)\langle\nu|\nu\rangle. \tag{15б}$$

Однако, норма вектора в пространстве Гильберта либо положительна, либо равна нулю, причем равенство нулю нормы является необходимым и достаточным условием равенства нулю вектора. Чтобы этот основной постулат выполнялся в нашем случае, необходимо и достаточно, чтобы $\nu \geqslant 0$ (свойство а))[1]. Условие равенства нулю вектора $a|\nu\rangle$ есть частный случай уравнения (15а). С другой стороны, векторы $a|\nu\rangle$ и $a^\dagger|\nu\rangle$ действительно удовлетворяют уравнениям на собственные значения теоремы, так как, согласно (14а) и (14б),

$$Na|\nu\rangle = a(N-1)|\nu\rangle = (\nu-1)a|\nu\rangle,$$

$$Na^\dagger|\nu\rangle = a^\dagger(N+1)|\nu\rangle = (\nu+1)a^\dagger|\nu\rangle,$$

что и требовалось доказать.

§ 4. Спектр и базисная система оператора N

Если $\nu > 0$, то предшествующая теорема применима и к вектору $a|\nu\rangle$, принадлежащему собственному значению $\nu - 1$. Это убеждает нас в том, что $\nu \geqslant 1$. Если $\nu > 1$, то теорема применима также к вектору $a^2|\nu\rangle$. Так мы образуем последовательность собственных векторов

$$a|\nu\rangle, a^2|\nu\rangle, \ldots, a^p|\nu\rangle, \ldots,$$

принадлежащих собственным значениям

$$\nu - 1, \nu - 2, \ldots, \nu - p, \ldots.$$

---

[1]) См. задачу VII.9.

Эта последовательность обязательно конечна, так как собственные значения N ограничены снизу нулем. Иначе говоря, векторы последовательности все равны нулю, начиная с некоторого $n+1$: действие a на собственный отличный от нуля вектор $a^n|\nu\rangle$, принадлежащий собственному значению $\nu-n$, дает 0; согласно в) это значит, что $\nu=n$.

Аналогичным образом можно применить нашу теорему к вектору $a^\dagger|\nu\rangle$, который очевидно не равен нулю и принадлежит собственному значению $(\nu+1)$, затем к вектору $a^{\dagger 2}|\nu\rangle$ и т. д. Так получается неограниченная последовательность отличных от нуля векторов

$$a^\dagger|\nu\rangle,\ a^{\dagger^2}|\nu\rangle,\ \ldots,\ a^{\dagger^p}|\nu\rangle,\ \ldots,$$

которые являются собственными векторами N, принадлежащими соответственно собственным значениям

$$\nu+1,\ \nu+2,\ \ldots,\ \nu+p,\ \ldots.$$

Приходим к заключению, *что спектр собственных значений оператора N образован последовательностью целых неотрицательных чисел*. Последовательность собственных векторов, принадлежащих каждый одному из значений спектра, получается повторным действием операторов a или $a^\dagger$ на один из этих векторов. Отношение норм двух соседних векторов дается соотношениями (15а) или (15б). Это множеств векторов образует полную систему. Действительно, можно показать, что всякая функция от a и $a^\dagger$, коммутирующая с N, является функцией N (задача 1). Поэтому оператор N образует сам по себе полный набор коммутирующих наблюдаемых и ни одно из его собственных значений не может быть вырождено.

Построенные нами векторы не являются нормированными на единицу. Но чтобы получить ортонормированный базис наблюдаемой N, достаточно умножить каждый вектор на соответствующую постоянную, которую следует выбрать, исходя из соотношений (15а) и (15б). Требование нормировки определяет указанную постоянную только с точностью до фазы, которую мы еще можем выбрать так, чтобы максимально упростить получающиеся формулы. В результате находим последовательность ортонормированных векторов

$$|0\rangle,\ |1\rangle,\ \ldots,\ |n\rangle,\ \ldots, \tag{16}$$

принадлежащих, соответственно, следующим собственным значениям N:

$$0,\ 1,\ \ldots,\ n,\ \ldots.$$

Векторы связаны друг с другом рекуррентными соотношениями:

$$a^{\dagger}\,|\,n\rangle = \sqrt{n+1}\,|\,n+1\rangle, \tag{17}$$

$$a\,|\,n\rangle = \sqrt{n}\,|\,n-1\rangle\,(n \neq 0), \tag{18}$$

$$a\,|\,0\rangle = 0. \tag{19}$$

Нетрудно проверить, что все они получаются из вектора $|0\rangle$ согласно формуле

$$|\,n\rangle = \frac{a^{\dagger n}}{\sqrt{n!}}\,|\,0\rangle, \tag{20}$$

удовлетворяют уравнению на собственные значения

$$N\,|\,n\rangle = n\,|\,n\rangle \tag{21}$$

и нормированы на единицу, т. е. удовлетворяют соотношениям

$$\langle n\,|\,n'\rangle = \delta_{nn'}. \tag{22}$$

Поскольку оператор N сам по себе составляет полный набор, последовательность векторов (16) образует полную систему векторов пространства динамических состояний изучаемой квантовой системы $\mathscr{E}$. Остается проверить внутреннюю согласованность нашего построения $\mathscr{E}$, а именно, убедиться, что векторы из $\mathscr{E}$ удовлетворяют всем требованиям, предъявляемым к векторам пространства Гильберта, а физические величины представлены наблюдаемыми, которые подчиняются правилам соответствующей алгебры. Мы не будем заниматься здесь этими тонкостями (задача 3).

§ 5. Представление {N}

Векторы последовательности (16) образуют базисную систему некоторого представления, которое будем называть представлением $\{N\}$. Из уравнений (17), (18), (19) и (21) нетрудно получить матрицы, соответствующие в этом представлении операторам N, a и $a^{\dagger}$. Если условиться располагать строки и столбцы этих матриц по порядку возрастающих квантовых чисел n (верхняя строка соответствует $n=0$, следующая строка — $n = 1$ и т. д.; левый столбец соответствует $n=0$, следующий столбец — $n=1$ и т. д.), то для оператора N получим диагональную матрицу

$$N = \begin{pmatrix} 0 & 0 & . & & . & . & . & . \\ 0 & 1 & 0 & & & & & \\ . & 0 & 2 & 0 & & & & \\ . & & 0 & 3 & 0 & & & \\ . & & & 0 & . & & & \\ . & & & & & . & & \\ & & & & & & . & \end{pmatrix},$$

для оператора a — вещественную матрицу

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots & \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & & \\ . & . & 0 & 0 & \sqrt{4} & . \\ . & . & & 0 & 0 & . \end{pmatrix},$$

где отличные от нуля элементы располагаются на диагонали, ближайшей сверху по отношению к главной диагонали, а для оператора $a^{\dagger}$ — эрмитово сопряженную матрицу

$$a^{\dagger} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ . & . & & \sqrt{4} & 0 \\ . & . & & & . \\ & & & & . \end{pmatrix},$$

где отличные от нуля элементы располагаются на диагонали, ближайшей снизу по отношению к главной. Ввиду того, что наблюдаемые квантовой системы выражаются как функции a и $a^{\dagger}$, нетрудно построить матрицы, соответствующие им в представлении $\{N\}$. В частности, имеем

$$\mathcal{H} = (N + 1/2)\,\hbar\omega, \tag{23}$$

$$q = \left(\frac{\hbar}{2m\omega}\right)^{1/2} (a^{\dagger} + a), \tag{24}$$

$$p = i\left(\frac{m\hbar\omega}{2}\right)^{1/2} (a^{\dagger} - a). \tag{25}$$

Оператор $\mathcal{H}$ диагонален в этом представлении, и его собственные значения равны

$$(n + 1/2)\,\hbar\omega \qquad (n = 0,\ 1,\ 2,\ \dots,\ \infty);$$

наблюдаемые q и p выражаются как линейные функции a и $a^{\dagger}$, так что отличные от нуля элементы представляющих их матриц располагаются на двух диагоналях, соседних с главной диагональю. Читатель сам без труда построит эти матрицы.

§ 6. Операторы рождения и уничтожения

Операторы N, a и $a^{\dagger}$ были введены для упрощения решения задачи на собственные значения. Если оператор $\mathcal{H}$ является гамильтонианом одной частицы в одном измерении, то эти операторы не имеют непосредственного физического смысла.

Однако задача на собственные значения $\mathscr{H}$ допускает и другую интерпретацию. Ввиду того, что уровни энергии эквидистантны с промежутком $\hbar\omega$, можно рассматривать $\mathscr{H}$ как гамильтониан системы тождественных частиц, находящихся в одном энергетическом состоянии $\hbar\omega$, число которых N может изменяться, так что каждое собственное состояние $\mathscr{H}$ соответствует определенному значению N и, следовательно, определенному значению полной энергии. Тогда вектор $|n\rangle$ представляет состояние, в котором присутствует n частиц: вектор $|0\rangle$ представляет состояние без частиц (вакуум). При переходе от состояния $|n\rangle$ к состоянию $|n+1\rangle$ число частиц увеличивается на единицу, а полная энергия системы возрастает на величину $\hbar\omega$. Замечаем, однако, что энергия пустого состояния равна не нулю, а величине $\hbar\omega/2$; этой аномалии можно избежать, если в качестве оператора энергии системы взять не $\mathscr{H}$, но $\mathscr{H}-\hbar\omega/2$.

Согласно этой интерпретации, оператор N представляет число частиц, и его собственные значения суть целые числа от 0 до $+\infty$. Оператор $a^\dagger$ преобразует состояние с n частицами в состояние с $(n+1)$ частицей: $a^\dagger$ есть *оператор рождения*. Оператор a наоборот уменьшает на единицу число присутствующих частиц: a есть *оператор уничтожения*.

Подобная интерпретация гармонического осциллятора широко используется в квантовой теории поля и в теории кристаллических и молекулярных колебаний. Электромагнитное поле, например, может быть представлено в виде суперпозиции плоских волн, характеризуемых вектором поляризации $\boldsymbol{\varepsilon}$ и волновым вектором $\boldsymbol{k}$, соответствующая частота равна $\omega = k/c$. Классически интенсивность каждой составляющей может изменяться непрерывно, но в квантовой теории эти изменения происходят скачкообразно целыми световыми квантами или фотонами с энергией $\hbar\omega$. Гамильтониан квантового электромагнитного поля выражается совокупностью членов, относящихся к фотонам определенного типа, который характеризуется $\boldsymbol{\varepsilon}$ и $\boldsymbol{k}$ (пусть индекс s обозначает комбинированный индекс $(\boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{k})$):

$$\mathbf{H} = \sum_s \mathscr{H}_s.$$

Каждый парциальный гамильтониан может быть записан в форме

$$\mathscr{H}_s = \hbar\omega_s a_s^\dagger a_s.$$

Операторы a_s и $a_s^\dagger$ эрмитово сопряжены друг другу и удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[a_s, a_{s'}^\dagger] = \delta_{ss'},$$

которые являются простым обобщением соотношения (10). При этом операторы a_s^+ и a_s интерпретируются соответственно, как операторы рождения и уничтожения фотона типа s (см. гл. XXI, т. II).

§ 7. Представление $\{Q\}$. Полиномы Эрмита

На языке волновой механики задача на собственные значения оператора $\mathcal{H}$ сводится к нахождению значений E, при которых уравнение

$$\mathcal{H}\psi(q) \equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{1}{2}m\omega^2q^2\right)\psi(q) = E\psi(q)$$

обладает решением, регулярным на обоих концах интервала $(-\infty, +\infty)$. Если воспользоваться в этой задаче рассуждениями гл. III (§ 10), то можно констатировать, что значение E, удовлетворяющие указанному выше условию, образуют дискретный спектр, причем каждому из значений E соответствует одно и только одно решение (определяемое с точностью до постоянного множителя); это решение имеет ограниченную норму. Этот результат вполне согласуется с выводами предшествующего параграфа о том, что спектр оператора полностью дискретен и невырожден. Решая задачу на собственные значения в указанной выше постановке, мы найдем вновь последовательность собственных значений оператора $\mathcal{H}$:

$$\frac{1}{2}\hbar\omega,\quad \frac{3}{2}\hbar\omega,\ \ldots,\ \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega,\ \ldots.$$

Принадлежащие этим значениям собственные функции $\psi_n(q) \equiv \langle q|n\rangle$ описывают собственные состояния $|n\rangle$ в представлении $\{q\}$.

В дальнейшем мы воспользуемся представлением $\{Q\}$, которое получается из $\{q\}$ заменой переменных (4). Собственные функции $u_n(Q)$ и $\psi_n(q)$, относящиеся к одному собственному состоянию $|n\rangle$ в представлениях $\{Q\}$ и $\{q\}$ соответственно связаны соотношением

$$\langle Q\,|\,n\rangle \equiv u_n(Q) = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/4}\psi_n(q).$$

Уравнение (8) является уравнением Шредингера в представлении $\{Q\}$ (с точностью до множителя $\hbar\omega$).

Собственные функции $u_0(Q)$, $u_1(Q)$, ..., $u_n(Q)$, ... получаются без труда с помощью соотношений (17—19). Собственная функция основного состояния удовлетворяет уравнению (19), т. е.

$$\left[\frac{d}{dQ} + Q\right]u_0(Q) = 0.$$

Нормированное на единицу решение этого уравнения имеет вид

$$u_0(Q) = \pi^{-1/4} e^{-Q^2/2}. \tag{26}$$

Из (17) и (18) можно получить соотношения, связывающие нормированные собственные функции, принадлежащие соседним собственным значениям (см. дополнение Б, раздел III). В частности, повторное применение (17) позволяет построить все собственные функции, исходя из функции u_0. Вместо (17) удобнее использовать соотношение (20), которое полностью эквивалентно ему, что дает

$$u_n(Q) = \left[\sqrt{\pi}\, 2^n n!\right]^{-1/2} \left(Q - \frac{d}{dQ}\right)^n e^{-Q^2/2}. \tag{27}$$

Пользуясь операторным тождеством

$$\left(Q - \frac{d}{dQ}\right) \equiv \left(-e^{Q^2/2} \frac{d}{dQ} e^{-Q^2/2}\right),$$

можно переписать уравнение (27) в форме (Б.70), где $H_n(Q)$ — полином Эрмита порядка n в соответствии с определением (Б.59). Таким образом, получаем, что $u_n(Q)$ выражается как произведение $\exp(-Q^2/2)$ на полином степени n и четности $(-1)^n$. Главные свойства этих полиномов указаны в дополнении Б, § 7.

Раздел II. ПРИЛОЖЕНИЯ И РАЗЛИЧНЫЕ СВОЙСТВА

§ 8. Производящая функция собственных функций $u_n(Q)$

В качестве примера приложения результатов теории найдем производящую функцию собственных функций $u_n(Q)$, т. е. функцию

$$F(t, Q) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(Q)\, t^n,$$

где c_n — соответствующие постоянные нормировки. Ввиду того что $u_n(Q)$ представляет вектор $(n!)^{-1/2} a^{+n} |0\rangle$ (уравнение (20)), функция $F(t, Q)$ представляет вектор

$$\sum_n \frac{c_n}{\sqrt{n!}} (a^+ t)^n |0\rangle.$$

Если выбрать

$$c_n = \frac{1}{\sqrt{n!}},$$

то $F(t, Q)$ будет представлять вектор $\exp(a^+ t)|0\rangle$

$$F(t, Q) = \langle Q | e^{a^+ t} | 0\rangle. \tag{28}$$