Лекция 11. Вычисления с осцилляторными функциями

В различных задачах, связанных с гармоническим

осциллятором, приходится вычислять интегралы типа

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_n(x) x^m f_k(x) dx \quad \text{или} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f_n(x) \frac{d^m}{dx^m} f_k(x) dx$$

где $f_i(x)$ - собственные функции гамильтониана осциллятора (везде в этой лекции под x будет подразумеваться безразмерная переменная). Проблема заключается в том, что у нас нет явных выражений для полиномов Эрмита (а только рекуррентные соотношения).

Лекция 11 (2 слайд)

Для полиномов Эрмита справедливы следующие рекуррентные соотношения (см., например, Г.Корн, Т.Корн, Справочник по математике)

$$2xH_n(x) = H_{n+1}(x) + 2nH_{n-1}(x)$$

$$\frac{dH_n(x)}{dx} = 2nH_{n-1}(x)$$

Используем первое из этих соотношений для вычисления интеграла

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} f_n(x) x f_k(x) dx$$

Лекция 11 (3 слайд)

Для этого представим осцилляторные функции как

произведения полиномов Эрмита на экспоненты

$\exp(-x^2/2)$, и для произведения $xH_k(x)$ воспользуемся

рекуррентным соотнош ением . В результате получим

$$I = A_n A_k \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x) e^{-x^2/2} x H_k(x) e^{-x^2/2} dx =$$

$$\frac{A_n A_k}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x) e^{-x^2/2} H_{k+1}(x) e^{-x^2/2} dx +$$

$$+ k A_n A_k \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(x) e^{-x^2/2} H_{k-1}(x) e^{-x^2/2} dx$$

Лекция 11 (4 слайд)

где

$$A_i = \frac{1}{\sqrt{2^i i! \sqrt{\pi}}}$$

нормировочные постоянные в осцилляторных функциях.

Отсюда сразу следует, что рассматриваемый интеграл, отличен от нуля только в том случае, когда индексы отличаются на единицу.

Лекция 11 (5 слайд)

Используя выражение для коэффициента A_k, имеем

$$A_k H_{k+1} e^{-x^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2^k k! \sqrt{\pi}}} H_{k+1} e^{-x^2/2} =$$

$$= \frac{\sqrt{2(k+1)}}{\sqrt{2^{k+1}(k+1)! \sqrt{\pi}}} H_{k+1} e^{-x^2/2} = \sqrt{2(k+1)}\, f_{k+1}$$

Поэтому первый интеграл сводится к выражению

$$\sqrt{\frac{(k+1)}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} f_n(x) f_{k+1}(x) dx = \sqrt{\frac{n}{2}}\, \delta_{nk+1}$$

Лекция 11 (6 слайд)

Аналогичные вычисления второго слагаемого приводят к следующему результату

$$\sqrt{\frac{(n+1)}{2}}\,\delta_{nk-1}$$

В результате получаем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_n(x)\,x\,f_k(x)\,dx = \sqrt{\frac{n}{2}}\,\delta_{nk+1} + \sqrt{\frac{(n+1)}{2}}\,\delta_{nk-1}$$

Лекция 11 (7 слайд)

Матричные элементы оператора производной

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} f_n(x) \frac{d}{dx} f_k(x) dx$$

можно вычислить с помощью второго рекуррентного соотношения. В результате для производной от собственной функции гамильтониана гармонического осциллятора имеем

$$\frac{d}{dx} f_k(x) = \frac{d}{dx} H_k(x) e^{-x^2/2} = \frac{dH_k(x)}{dx} e^{-x^2/2} - xH_k(x) e^{-x^2/2}$$

Лекция 11 (8 слайд)

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} f_n(x) \frac{d}{dx} f_k(x) dx = -\sqrt{\frac{n}{2}}\, \delta_{nk+1} + \sqrt{\frac{(n+1)}{2}}\, \delta_{nk-1}$$

Отсюда следует, что матрица оператора импульса в базисе из осцилляторных функций также является околодиагональной.

Лекция 11 (9 слайд)

Все вычисления мы проводили в безразмерных переменных. После восстановления размерности (через параметр длины для осциллятора $\sqrt{\hbar / m\omega}$, и параметр импульса $\sqrt{\hbar m\omega}$), получим

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f_n(x)\hat{x} f_k(x)dx = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\,\delta_{nk+1} + \sqrt{\frac{(n+1)}{2}}\,\delta_{nk-1}\right)$$

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f_n(x)\hat{p} f_k(x)dx = i\sqrt{\hbar m\omega}\left(\sqrt{\frac{n}{2}}\,\delta_{nk+1} - \sqrt{\frac{(n+1)}{2}}\right)$$

Лекция 11 (10 слайд)

Аналогично вычисляются интегралы

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f_n(x)\hat{x}^2 f_k(x)dx = \frac{\hbar}{m\omega}\left(\frac{1}{2}\sqrt{(n+2)(n+1)}\;\delta_{nk-2} + \left(n+\frac{1}{2}\right)\delta_{nk} + \frac{1}{2}\sqrt{n(n-1)}\;\delta_{nk+2}\right)$$

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f_n(x)\hat{p}^2 f_k(x)dx = \hbar m\omega\left(\frac{1}{2}\sqrt{(n+2)(n+1)}\;\delta_{nk-2} + \left(n+\frac{1}{2}\right)\delta_{nk} + \frac{1}{2}\sqrt{n(n-1)}\;\delta_{nk+2}\right)$$