Лекция 9. Одномерный гармонический осциллятор (решение в виде ряда)

Стационарное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2 f(x)}{dx^2}+\frac{m\omega^2 x^2}{2}f(x)=Ef(x)$$

Перейдем к безразмерным переменным ξ и λ

$$\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x \qquad \lambda=\frac{2\varepsilon}{\hbar\omega}$$

В новых переменных у.Ш. принимает вид

$$\frac{d^2 f(\xi)}{d\xi^2}+\left(\lambda-\xi^2\right)f(\xi)=0$$

Лекция 9 (2 слайд)

Перейдем к новой неизвестной функции $u(\xi)$:

$$f(\xi) = u(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Подставляя это выражение в уравнение, получим для $u(\xi)$:

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

Лекция 9 (3 слайд)

Ищем решение в виде степенного ряда

$$u(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \xi^k$$

где C_k -
коэффициенты. Подставляя ряд в уравнение, получим

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) C_k \xi^{k-2} - 2\sum_{k=0}^{\infty} k C_k \xi^k + (\lambda - 1)\sum_{k=0}^{\infty} C_k \xi^k = 0$$

Меняя в первом слагаемом индекс суммирования $k \to k' + 2$ и собирая одинаковые степени ξ, найдем рекуррентное соотношение

$$C_{k+2} = \frac{2k + 1 - \lambda}{(k+1)(k+2)} C_k$$

Лекция 9 (4 слайд)

Таким образом, чтобы ряд определял решение его коэффициенты должны быть связаны этим соотношением. При этом, поскольку рекуррентное соотношение связывает C_k и C_{k+2}, оно связывает отдельно четные и нечетные коэффициенты. Поэтому C_0 и C_1 могут быть выбраны произвольно. В частности, ряды с $C_0 = 1$ и $C_1 = 0$ (то есть ряд по четным степеням ξ) и $C_0 = 0$ и $C_1 = 1$ (то есть ряд по нечетным степеням) определяют два линейно независимых частных решения уравнения).

Лекция 9 (5 слайд)

Для больших k

рекуррентное соотношение имеет вид:

$$C_{k+2} = \frac{2}{k} C_k$$

Соотношение (9) для четных индексов отвечает разложению в

ряд Тейлора функции $\exp\left(\xi^2\right)$ $\xi \exp\left(\xi^2\right)$ - нечетных. Это

и для

значит, что при больших ξ

оба частных решения уравнения

содержат экспоненту $\exp\left(\xi^2\right)$. соответствующие

Поэтому

частные решения у. $f(\xi)$ $\xi \to \pm\infty$.

Ш расходятся при

Лекция 9 (6 слайд)

Однако при $\lambda = 2n+1$ (или $E = \hbar\omega(n+1/2)$), коэффициент C_{n+2} обращается в нуль. В этом случае будут равны нулю и коэффициенты C_{n+4}, C_{n+6}, … . Поэтому в этом случае ряд содержит конечное число слагаемых. В этом случае одно из решений $f(\xi) = u(\xi)\exp\left(-\xi^2/2\right)$, является ограниченной функцией. Следовательно, $E = \hbar\omega(n+1/2)$ и $f(\xi)$ являются собственными значениями и собственными функциями.

Лекция 9 (7 слайд)

Найдем явно несколько первых решений. При $E = \hbar\omega / 2$

$(n = 0)$,

обрыв ряда происходит при переходе от нулевого
коэффициента ко второму. То есть $C_2 = 0$.

Ряд же по
нечетным степеням ξ E

при таком значении не обрывается,
и потому его нужно сделать равным нулю, взяв коэффициент

$C_1 = 0$. $u(\xi)$ улевой

Поэтому функция в этом случае - многочлен н
Таким образом, значение $E_0 = \hbar\omega / 2$ -

минимальное
собственное значение, собственная функция

$$f_0(\xi) = C_0 \exp\left(-\xi^2 / 2\right)$$

Лекция 9 (8 слайд)

Следующее значение энергии, при котором происходит обрыв ряда $E = 3\hbar\omega / 2$ $(n = 1)$. В этом случае обращается в нуль коэффициент C_3. Ряд по четным степеням ξ надо сделать тождественно равным нулю, выбрав $C_0 = 0$.

$$E_1 = 3\hbar\omega / 2 \qquad f_1(\xi) = C_1 \xi \exp\left(-\xi^2 / 2\right)$$

Аналогично найдем

$$E_2 = 3\hbar\omega / 2 \qquad f_2(\xi) = C_0 (1 - 2\xi^2) \exp\left(-\xi^2 / 2\right)$$

и т.д.

Лекция 9 (9 слайд)

Таким образом, собственные значения и собственные функции осциллятора имеют вид

$$E_n = \hbar\omega(n + 1/2) \qquad f_n(\xi) = A_n H_n(\xi)\exp\left(-\xi^2/2\right) \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

где $H_n(\xi)$ - многочлены n-ой степени, которые называются полиномами Эрмита.

Лекция 9 (10 слайд)

Как следует из проведенного выше вывода, полиномы Эрмита с четными индексами содержат только четные степени ξ , с нечетными - нечетные. Это значит, что собственные функции, отвечающие четным уровням энергии (нулевому, второму и т.д.) являются четными функциями координаты, нечетным уровням (

первому, третьему и т.д.) - нечетными