Элементы квантовой механики
(продолжение 3)

Квантовый осциллятор

Гармонический осциллятор в физике

Нам предстоит рассмотреть еще одну одномерную задачу квантовой механики. Роль гармонического осциллятора (помните – «грузик на пружинке» в классической механике) во многих разделах физики трудно переоценить. Вспомним, что поляризация диэлектриков связана с возникновением электрических дипольных моментов; когда речь идет об электрическом поле не слишком интенсивной световой волны, диполи совершают вынужденные гармонические колебания. Это приводит ко многим явлениям, например, к дисперсии света. Колеблющиеся электроны в диполях излучают вторичные волны, суперпозиция которых приводит к появлению отраженной волны, а сложение с падающим светом – к распространению преломленной волны.

Одним словом, гармонические осцилляторы – основной элемент модели конденсированных сред и их взаимодействия со световой волной. Вспомним, наконец, гипотезу Планка, так что само зарождение квантовой механики связано с необычными свойствами микроскопических осцилляторов. Настала пора изучить их свойства на основе знаний, полученных на предыдущих лекциях, но сначала небольшое математическое отступление, которое сильно упростит нашу задачу. Впрочем, все выводы я представлю мелким шрифтом, так что их можно пропустить. Но не пропустите заодно и текст с обычным шрифтом!

Рассмотрим пару взаимно эрмитово сопряженных операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^{+}$.[1] Наложим на них одно единственное дополнительное условие, а именно, потребуем, чтобы их коммутатор был равен единице $[\hat{a},\hat{a}^{+}]=1$. Как мы помним, это значит, что

Операторы рождения и уничтожения

$$\hat{a}\hat{a}^{+}-\hat{a}^{+}\hat{a}=1. \quad (1)$$

Коммутатор

Это требование делает оператор $\hat{a}$ «оператором уничтожения», а $\hat{a}^{+}$ – «оператором рождения». Почему они так называются и что именно они рождают и уничтожают, мы обсудим в самом конце лекции, а сейчас только заметим, что эти операторы, не будучи самосопряженными, не могут соответствовать какой-либо физической величине.

Введем еще один важный оператор

Оператор числа элементарных возбуждений

$$\widehat{N}=\hat{a}^{+}\hat{a}. \quad (2)$$

Его правильное название записано на полях, но часто, особенно в физике твердого тела, его еще называют «оператором числа частиц». В связи с этим сразу скажу, что используются эти операторы и в других разделах физики, в частности, в квантовой теории поля, представляя собой основу так называемого «вторичного квантования». Вообще, если до сих пор мы говорили о квантовой механике первой трети XX века, то сейчас одним глазком заглядываем в почти современную теорию.

Ясно, оператор $\widehat{N}$ эрмитово самосопряженный.[2]Но самое интересное заключается в том, что мы можем сразу найти все его собственные значения!

Сначала докажем, что (см. на полях)

1. Все собственные значения оператора $\widehat{N}$ - неотрицательные (действительные) числа.

Пусть φ есть собственная функция оператора $\widehat{N}$, принадлежащая собственному значению n, т.е.

$$\widehat{N}\varphi=n\varphi.$$

Умножим это равенство скалярно слева на φ:

$$(\varphi,\widehat{N}\varphi)=n(\varphi,\varphi)$$

Левая часть этого равенства $\left(\varphi,\widehat{N}\varphi\right)=(\varphi,\hat{a}^{+}\hat{a}\varphi)=(\hat{a}\varphi,\hat{a}\varphi)\geq 0$, поскольку последнее скалярное произведение есть квадрат нормы функции $\hat{a}\varphi$.[3] По этой же причине неотрицательно и скалярное произведение в правой части, так что $n\geq 0$, и утверждение доказано.

---

[1] Напомним, что это просто означает, что $(\hat{a}^{+}\psi_1,\psi_2)=(\psi_1,\hat{a}\psi_2)$ для любых волновых функций ψ_1 и ψ_2, или, в непосредственной записи скалярного произведения,

$$\int_{-\infty}^{+\infty}(\hat{a}^{+}\psi_1(x))^{*}\cdot\psi_2(x)dx=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1(x)^{*}\cdot\hat{a}\psi_2(x)dx.$$

[2] Это следует из свойств, о которых мы уже говорили: $(\hat{A}\hat{B})^{+}=\hat{B}^{+}\hat{A}^{+}$ и $(\widehat{A}^{+})^{+}=A$.

[3] Для дальнейшего заметим, что $(\hat{a}\varphi,\hat{a}\varphi)=\int_{-\infty}^{+\infty}|\hat{a}\varphi(x)|^2dx=0$ только при $\hat{a}\varphi=0$.

Теперь докажем, что (см. на полях)
Итак, надо доказать, что если

$$\hat{N}\varphi_n = n\,\varphi_n, \text{ то } \hat{N}\hat{a}^+\varphi_n = (n+1)\,\hat{a}^+\varphi_n\ .$$

Это делается в одну строчку (см. (1) и (2)):[1]

$$\hat{N}\hat{a}^+\varphi_n = \hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\,\varphi_n = \hat{a}^+\big(\hat{N}+1\big)\varphi_n = (n+1)\,\hat{a}^+\varphi_n, \text{ ч.т.д.}$$

Таким образом, действуя последовательно оператором $\hat{a}^+$на некоторую собственную функцию φ_n оператора $\hat{N}$, мы получаем собственные функции для собственных значений $n+1, n+2$ ...

Аналогично доказывается, что [2] (см. на полях)

Следовательно, действуя последовательно оператором $\hat{a}$ на некоторую собственную функцию φ_n оператора $\hat{N}$, мы получаем собственные функции для собственных значений $n-1, n-2$ ... Но утверждения 1 и 3 вроде как противоречат друг другу. В самом деле, кажется, что уменьшая собственные значения, мы неминуемо придем в отрицательную область, но ведь они не могут быть отрицательными!

Есть только одна возможность разрешить это противоречие, а именно заключить, что *все собственные значения оператора* $\hat{N}$ – неотрицательные *целые числа.* Действительно, тогда в процессе уменьшения собственного значения мы неминуемо придем к функции φ_0 такой, что

$$\hat{N}\varphi_0 = 0\cdot\varphi_0\ = 0,$$

(собственное значение равно нулю), и процесс остановится, так как $\hat{a}0 = 0$. При этом

$$0 = (\varphi_0, \hat{N}\varphi_0) = (\hat{a}\varphi_0, \hat{a}\varphi_0), \text{ так что}$$

$$\hat{a}\varphi_0 = 0 \qquad (3)$$

(см. примечание 2 на предыдущей странице).
Мы увидим, что именно это равенство удобно использовать для нахождения функции φ_0.

Итак, мы нашли (буквально не из чего) все возможные собственные значения (как оказалось, мы недаром обозначали их буквой n) оператора $\hat{N}$, но прежде чем перейти к квантовому осциллятору, займемся небольшой технической работой. Пусть нам удалось найти и нормировать функцию φ_0. Действуя на нее оператором рождения $\hat{a}^+$, мы получим собственные функции, принадлежащие собственным значениям 1, 2, …, но, увы, они не будут нормированными. Пусть функция φ_n нормирована. Вычислим норму функции $\hat{a}^+\varphi_n$:

2. Если φ_n – собственная функция оператора $\hat{N}$, принадлежащая собственному значению n, то $\hat{a}^+\varphi_n$ - тоже собственная функция $\hat{N}$, но принадлежащая с.з. $n+1$.

3. Если φ_n – собственная функция оператора $\hat{N}$, принадлежащая собственному значению n, то $\hat{a}\varphi_n$ - тоже собственная функция $\hat{N}$, но принадлежащая с. з. $n-1$.

Уравнение для основного состояния.

[1] Если α –любое комплексное число и $\hat{N}\,\varphi_n = n\,\varphi_n$, то $(\hat{N}+\alpha)\varphi_n = (n+\alpha)\,\varphi_n$, а число коммутирует с любым оператором.
[2] Это простое и хорошее упражнение остается студентам.

$$(\hat{a}^+\varphi_n, \hat{a}^+\varphi_n) = (\varphi_n, \hat{a}\hat{a}^+\varphi_n) = \left(\varphi_n, (\hat{N}+1)\varphi_n\right) = (n+1),$$

так что нормированную функцию, принадлежащую собственному значению $n+1$ можно записать в виде

Рекуррентная формула для собственных функций оператора $\hat{N}$.

$$\varphi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}}\hat{a}^+\varphi_n.$$

Последовательно получаем

$$\varphi_1 = \frac{1}{\sqrt{1}}\hat{a}^+\varphi_0,\ \ \varphi_2 = \frac{1}{\sqrt{1\cdot 2}}\hat{a}^+\hat{a}^+\varphi_0,$$

и вообще

$$\varphi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n\varphi_0 \qquad (4)$$

Получающаяся последовательность функций – ортонормированная, поскольку собственные функции эрмитово самосопряженного оператора, принадлежащие разным собственным значениям, взаимно ортогональны (см. Дополнение 1).

Теперь обратимся к осциллятору. Полную механическую энергию материальной точки, колеблющейся на пружинке с коэффициентом жесткости k (так что возвращающая сила $F = -kx$, где x – смещение от положения равновесия) запишем в виде

Энергия классического осциллятора

$$E_{\text{кл}} = \frac{kx^2}{2} + \frac{p^2}{2m}.$$

Поскольку что такое «жесткость пружинки» для микроскопического осциллятора не очень понятно, вспомним, что собственная частота ω (именно она определяется в эксперименте) легко выражается через k и m ($\omega = \sqrt{k/m}$) и заменим k на $m\omega^2$.

Теперь можем записать квантово-механический гамильтониан («расставить домики»):

Гамильтониан осциллятора

$$\hat{H} = \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} + \frac{\hat{p}^2}{2m} \qquad (5)$$

и приступить к нахождению стационарных энергий E и функций, решая задачу на собственные значения оператора $\hat{H}$;

Стационарное уравнение Шредингера для осциллятора

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$$

или, в явном виде,[1]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{m\omega^2x^2}{2} - E\right)\psi(x) = 0.$$

[1] Напомним, что $\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$ и $\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\, d\psi(x)/dx$

Решения этого уравнения не выражаются через элементарные функции,[1] и задача на собственные значения оказывается весьма утомительной.

Мы не будем этого делать, поскольку гамильтониан (5) легко выражается через оператор $\widehat{N}$. В самом деле, положим[2]

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\,\hat{p}. \tag{6a}$$

Поскольку операторы $\hat{x}$ и $\hat{p}$ эрмитово самосопряженные, то

$$\hat{a}^{+} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}\,\hat{p}. \tag{6b}$$

Прежде всего, проверим соотношение коммутации (1): [3]

$$[\hat{a},\hat{a}^{+}] = -\frac{i}{2\hbar}[\hat{x},\hat{p}] + \frac{i}{2\hbar}[\hat{p},\hat{x}] = -\frac{i}{\hbar}[\hat{x},\hat{p}] = -\frac{i}{\hbar}(i\hbar) = 1.$$

Мы воспользовались равенством $[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar$. Можно работать почти как с числами, но не переставлять операторы в произведениях.

Теперь найдем оператор $\widehat{N}$:

$$\widehat{N} = \hat{a}^{+}\hat{a} = \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{x}^2 + \frac{1}{2m\omega\hbar}\hat{p}^2 - \frac{1}{2}$$

или, перенося одну вторую в левую часть равенства и умножая на $\hbar\omega$,

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

Но правая часть в точности совпадает с нашим гамильтонианом (5), поэтому

$$\widehat{H} = \hbar\omega\left(\widehat{N} + \frac{1}{2}\right). \tag{7}$$

Поскольку $\widehat{H}\varphi_n = \hbar\omega\left(\widehat{N} + \frac{1}{2}\right)\varphi_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\varphi_n$, то собственные функции ψ_n гамильтониана $\widehat{H}$ совпадают с собственными функциями φ_n оператора $\widehat{N}$, а собственные значения я выпишу уже нормальным шрифтом.

Стационарные уровни энергии кв. осциллятора

Стационарные значения энергии осциллятора суть

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), n = 0, 1, 2, \ldots \tag{8}$$

Основное (невозбужденное) состояние имеет энергию $\frac{\hbar\omega}{2}$, и далее все уровни располагаются эквидистантно с разностью $\hbar\omega$. Ненулевая энергия основного состояния согла-

[1] Собственные функции гамильтониана $\widehat{H}$ представляют собой комбинации экспоненты с полиномами Эрмита. Многочлены – элементарные функции, но ортогональные многочлены обычно относят к специальным функциям.

[2] Мы как бы угадали коэффициенты, но их можно получить (см. Дополнение 2).

[3] Для коммутаторов справедливо легко проверяемое непосредственно из определения свойство $[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C} + \hat{D}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{D}] + [\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{D}]$. Кроме того, числовые множители можно выносить за скобки, и $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$.

суется с принципом неопределенности Гейзенберга. Еще отметим, что Планк чуть-чуть не угадал, приписав основному состоянию нулевую энергию.

Переходя с одного уровня энергии на другой, осциллятор испускает или поглощает фотон с энергией $\hbar\omega$. Поскольку энергетические уровни эквидистантны, может показаться, что возможно поглощение или испускание квантов света с энергией $n\hbar\omega, n > 1$. Однако выходящий за рамки нашего курса анализ показывает, что такие процессы запрещены.[1]

Для дальнейшего удобно ввести обозначение

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \qquad (9)$$

Нам осталось построить сами функции стационарных состояний. Начнем с нахождения ψ-функции основного состояния исходя из соотношения (3). Используя (6а) и производя замену $\hat{p} \to -i\hbar\frac{d}{dx}$, получаем уравнение

$$\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{d}{dx}\right)\psi_0(x) = 0$$

или, приводя к стандартному виду и используя обозначение (9), уравнение

$$\psi_0'(x) + \frac{x}{{x_0}^2}\psi_0(x) = 0.$$

Это уравнение *первого* порядка легко решается.

Для ψ-функции основного состояния имеем[2]

$$\psi_0(x) = A \cdot exp(-\frac{x^2}{2{x_0}^2}),$$

а постоянная A находится, как всегда, из условия нормировки

$$A^2\int_{-\infty}^{+\infty} exp(-\frac{x^2}{{x_0}^2})dx = 1.$$

После вычисления интеграла (см. Дополнение 4) окончательно получаем, что нормированная ψ-функция основного состояния имеет вид

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}}exp(-\frac{x^2}{2{x_0}^2}).$$

ψ-функция основного состояния.

[1] Точнее, очень маловероятны.

[2] Если вы не читали мелкий шрифт, то полезно проверить эту функцию подстановкой в уравнение Шредингера.

Остальные собственные функции вычисляются по формуле (4) после подстановки в нее выражения для оператора $\hat{a}^+$ (6b):

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} 2^{-n/2} \left(\frac{x}{x_0} - x_0 \frac{d}{dx}\right)^n \psi_0(x).$$

ψ-функция произвольного состояния.

На рисунке показаны квадраты модулей первых трех стационарных функций вместе с потенциальной и полной энергией квантового осциллятора.

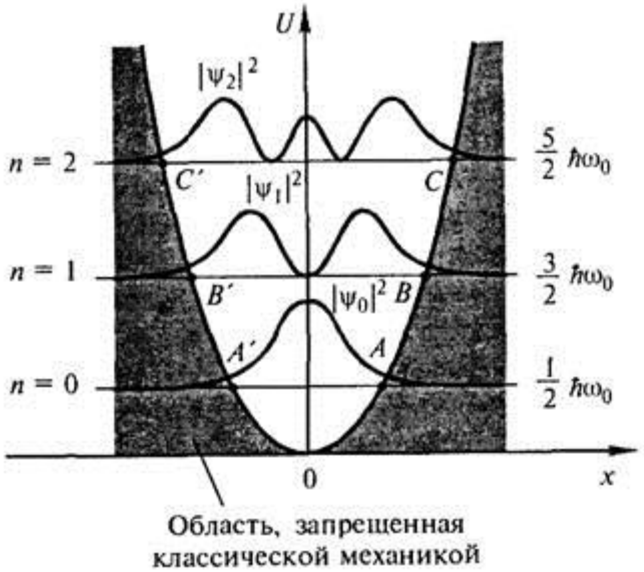

Рисунок взят со странички http://matses.ru/fis_kinem/postulat86.htm.

Введенный выше параметр x_0 (9) обычно называют «амплитудой нулевых колебаний» по двум причинам. Во-первых, смещение осциллятора в основном состоянии в пределах $-x_0 < x < x_0$ наиболее вероятно ($|\psi_0(x_0)|^2 = 1/e$), а во-вторых, величина x_0 в некотором смысле соответствует амплитуде классического осциллятора с такой же энергией. В самом деле, если мы приравняем энергию $\frac{kA^2}{2} = \frac{m\omega^2 A^2}{2}$ классического осциллятора с амплитудой A энергии основного состояния квантового осциллятора $\hbar\omega/2$, то и получим $A = x_0$.

С помощью формул (6) можно получить выражения для операторов $\hat{x}$ и $\hat{p}$ через операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$(см. Дополнение 2), позволяющие, в частности легко считать средние значения физических величин, не прибегая к интегралам от ψ -функций (Дополнение 3).

Тот факт, что уровни энергии гармонического осциллятора эквидистантны, позволяет несколько изменить терминологию. Вместо слов «осциллятор перешел на следующий энергетический уровень» используют оборот «к осциллятору добавилось элементарное возбуждение с энергией $\hbar\omega$». Это связано с тем, что, например, в кристалле действительно существуют различные «возбуждения», которые описываются как бы осцилляторами. С одним типом таких возбуждений (фононы) мы познакомимся несколько позже.

В этой терминологии оператор рождения описывает возникновение дополнительного возбуждения, а оператор уничтожения таки уничтожает его. Теперь становится понятным и название оператора $\widehat{\mathrm{N}}$, собственные значения которого определяют число элементарных возбуждений.

Дополнение 1

Собственные функции эрмитово самосопряженного оператора, принадлежащие разным собственным значениям, взаимно ортогональны.

Пусть $\hat{A}$ – эрмитово самосопряженный оператор, ($\hat{A}^{+} = \hat{A}$), ψ_1 и ψ_2 – его собственные функции, принадлежащие соответственно собственным значениям a_1 и a_2 ($a_1 \neq a_2$):

$$\hat{A}\psi_1 = a_1\psi_1, \quad \hat{A}\psi_2 = a_2\psi_2.$$

Умножим скалярно первое из этих равенств слева на ψ_2, а второе – справа на ψ_1:

$$(\psi_2, \hat{A}\psi_1) = a_1(\psi_2\psi_1), \; (\hat{A}\psi_2, \psi_1) = a_2(\psi_2, \psi_1).$$

Поскольку $\left(\psi_2, \hat{A}\psi_1\right) = (\hat{A}\psi_2, \psi_1)$ для самосопряженного оператора $\hat{A}$, то вычитая почленно из первого равенства второе, получаем $0 = (a_1 - a_2)(\psi_2, \psi_1)$, и так как ($a_1 \neq a_2$), то $(\psi_2, \psi_1) = 0$, ч.т.д.

Дополнение 2

Пусть

$$\hat{a} = \alpha\hat{x} + i\beta\hat{p} \text{ и } \hat{a}^{+} = \alpha\hat{x} - i\beta\hat{p}.$$

Потребуем, чтобы коммутатор правых частей был равен единице, вычисляя его, получаем

$$2\alpha\beta\hbar = 1.$$

Исключим множитель β и выразим $\hat{x}$ и $\hat{p}$ через $\hat{a}$ и $\hat{a}^{+}$:

$$\hat{x} = \frac{(\hat{a} + \hat{a}^{+})}{2\alpha}, \; \hat{p} = i\alpha\hbar(\hat{a}^{+} - \hat{a}),$$

затем вычислим

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{\alpha^2\hbar^2}{2m}(2\widehat{N} + 1 - \hat{a}\hat{a} - \hat{a}^{+}\hat{a}^{+})$$

и

$$\frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2} = \frac{m\omega^2}{8\alpha^2}(2\hat{N} + 1 + \hat{a}\hat{a} + \hat{a}^+\hat{a}^+).$$

Выберем α так, чтобы в сумме исчезли слагаемые с произведениями $\hat{a}\hat{a}$ и $\hat{a}^+\hat{a}^+$, что дает $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}$ и, соответственно $\beta = \sqrt{\frac{1}{2m\omega\hbar}}$. Используя параметр x_0 (см. (9)), перепишем окончательные формулы для операторов координаты и импульса:

$$\hat{x} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(\hat{a}^+ + \hat{a}),\ \hat{p} = \frac{i\hbar}{\sqrt{2}x_0}(\hat{a}^+ - \hat{a}). \qquad (10)$$

Дополнение 3

Напомню, что квантово-механическое среднее значение физической величины A с оператором $\hat{A}$, в состоянии, описываемом нормированной функцией ψ, находится по формуле [1]

$$< A > = (\psi, \hat{A}\psi). \qquad (11)$$

Пусть, как и раньше, ψ_n – нормированные функции оператора $\hat{H}$ (7), совпадающие с собственными функциями оператора $\hat{N}$ ($\psi_n = \varphi_n,\ \hat{N}\varphi_n = n\,\varphi_n$). Заметим, что скалярные произведения $(\psi_n, \hat{a}\psi_n) = (\psi_n, \hat{a}^+\psi_n) = (\psi_n, \hat{a}\hat{a}\psi_n) = (\psi_n, \hat{a}^+\hat{a}^+\psi_n) = 0$, так как использованные операторы преобразуют функцию ψ_n в другую собственную функцию, ортогональную к ней (см. Дополнение 1).

Вообще, если некоторый оператор $\hat{A}$ представляет собой произведение операторов рождения и уничтожения, то только в том случае, когда число операторов рождения равно числу операторов уничтожения скалярное произведение $(\psi_n, \hat{A}\psi_n)$ не равно нулю, причем такое произведение выражается через оператор $\hat{N}$ и его степени. Делается это с помощью коммутатора (1) также как при доказательстве свойств операторов $\hat{a}$ и $\hat{a}^+$. Например,

$$\hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+ = (\hat{a}^+\hat{a} + 1)(\hat{a}^+\hat{a} + 1) = (\hat{N} + 1)(\hat{N} + 1) =$$
$$= \hat{N}^2 + 2\hat{N} + 1, \text{ так что}$$

$$(\psi_n, \hat{a}\hat{a}^+\hat{a}\hat{a}^+\psi_n) = (\psi_n, (\hat{N}^2 + 2\hat{N} + 1)\psi_n) =$$
$$= (n^2 + 2n + 1)(\psi_n, \psi_n) = (n^2 + 2n + 1),$$

поскольку функция ψ_n нормирована. Эти соображения позволяют легко вычислять средние значения физических величин. Приведем несколько примеров.

Взглянув на формулы (10) и (11), сразу заключаем, что для стационарных состояний гармонического осциллятора $< x >= 0$ и $< p >= 0$, как это, конечно, и должно быть. Вычислим теперь среднее значение квадрата смещения в n-том стационарном состоянии

$$< x^2 >= \frac{{x_0}^2}{2}\left(\psi_n, (\hat{a}^+ + \hat{a})^2\psi_n\right) =$$

[1] В одномерном случае развернутая запись этой формулы имеет вид

$$< A > = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\,\hat{A}\psi(x)dx.$$

$$= \frac{{x_0}^2}{2}(\psi_n, (\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+)\psi_n) = \frac{{x_0}^2}{2}(\psi_n, (2\hat{N} + 1)\psi_n) = {x_0}^2(n + \frac{1}{2})$$

и среднее значение квадрата импульса

$$< p^2 >= -\frac{\hbar^2}{2{x_0}^2}(\psi_n, (\hat{a}^+ - \hat{a})^2) =$$

$$= \frac{\hbar^2}{2{x_0}^2}(\psi_n, (\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+)\psi_n) = \frac{\hbar^2}{{x_0}^2}(n + \frac{1}{2}).$$

Поскольку средние значения смещения и импульса равны нулю, то среднеквадратические отклонения этих величин суть

$$\Delta x = x_0\sqrt{(n + \frac{1}{2})},\ \Delta p = \frac{\hbar}{x_0}\sqrt{(n + \frac{1}{2})},$$

и

$$\Delta x\, \Delta p = \hbar(\frac{1}{2} + n),$$

Соотношение неопределенностей

что согласуется с соотношением неопределенностей Гейзенберга.

Дополнение 4

Интегралы вида $\int_0^\infty x^n e^{-x^2}\,dx$ (целое $n \geq 0$)

Сначала мы напомним простейший способ вычисления интеграла Эйлера – Пуассона

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}\,dx.$$

Запишем $I^2 = (\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}\,dx)\,(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-y^2}\,dy) = \iint e^{-(x^2+y^2)}dxdy$, где интеграл берется по всей плоскости xy, и перейдем к полярным координатам:

$$I^2 = 2\pi\int_0^\infty e^{-r^2} r dr = \pi, \text{ так что } I = \sqrt{\pi}.$$

В силу четности подынтегральной функции $\int_0^\infty e^{-x^2}\,dx = \sqrt{\pi}/2$. Интегралы вида $\int_0^\infty x^n e^{-x^2}\,dx$ (где целое $n > 0$) вычисляются интегрированием по частям, при четном n они сводятся к интегралу Эйлера – Пуассона, а при нечетном, конечно, неопределенный интеграл представляет собой элементарную функцию.

Отметим еще, что при наличии дополнительного постоянного множителя в экспоненте зависимость результат от него можно получить мгновенно из «соображений размерности». Пусть, например, речь идет об интеграле $\int_0^\infty x^2 e^{-\alpha x^2}\,dx$. Сделаем мысленно переменную интегрирования x размерной, например, положим, что она измеряется в метрах. Поскольку аргумент любой функции,[1]

[1] Своеобразное исключение – логарифмическая функция, которая *временно* может иметь размерный аргумент, потому что $\ln(4\text{м}) - \ln(2\text{м}) = \ln\left(\frac{4\text{м}}{2\text{м}}\right) = \ln(2)$.

как и сама функция, должен быть безразмерным, то размерность α будет м$^{-2}$. Весь интеграл имеет размерность, определяемую произведением x^2dx, т.е. м^3, так что результат будет содержать множитель $\alpha^{-3/2}$.