<u>Wykład VI</u> Mechanika kwantowa

Oscylator harmoniczny

Rozważamy jednowymiarowy problem cząstki w potencjale harmonicznym $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$, gdzie ω jest klasyczną częstością oscylacji. Rozwiązujemy następujące równanie Schrödingera

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right)\psi(x) = E\psi(x) .$$

Wprowadzamy nową zmienną $z = a\,x$, dobierając parametr a tak, aby równanie Schrödingera przyjęło postać

$$\boxed{\left(\frac{d^2}{dz^2} + \lambda - z^2 \right)\psi(z) = 0}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} a^2 \frac{d^2}{dz^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{z^2}{a^2} - E \right)\psi(z) = 0 \;\Bigg|\times\left(-\frac{2m}{\hbar^2 a^2} \right),$$

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2 a^4} z^2 + \frac{2mE}{\hbar^2 a^2} \right)\psi(z) = 0 \quad\Rightarrow\quad a = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}, \quad \lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega},$$

Jeśli $z^2 \to \infty$

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - z^2 \right)\psi(z) \approx 0 \quad\Rightarrow\quad \psi(z) \approx C\,e^{-\frac{z^2}{2}}$$

$$\frac{d}{dz}\psi(z) = -C\,z\,e^{-\frac{z^2}{2}}$$

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) = -C\,e^{-\frac{z^2}{2}} + C\,z^2\,e^{-\frac{z^2}{2}} \approx C\,z^2\,e^{-\frac{z^2}{2}} = z^2\psi(z)$$

Rozwiązania szukamy w formie $\psi(z) = e^{-\frac{z^2}{2}} H(z)$

$$\frac{d}{dz}\psi(z) = -z\,e^{-\frac{z^2}{2}} H(z) + e^{-\frac{z^2}{2}}\frac{dH(z)}{dz}$$

$$\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) = -e^{-\frac{z^2}{2}} H(z) + z^2\,e^{-\frac{z^2}{2}} H(z) - 2z e^{-\frac{z^2}{2}}\frac{dH(z)}{dz} + e^{-\frac{z^2}{2}}\frac{d^2H(z)}{dz^2}$$

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + \lambda - z^2 \right)\psi(z) = 0 \quad\Rightarrow\quad e^{-\frac{z^2}{2}}\left(\frac{d^2}{dz^2} - 2z\frac{d}{dz} + \lambda - 1 \right)H(z) = 0$$

$$\boxed{H''(z) - 2zH'(z) + (\lambda - 1)H(z) = 0}$$

Wykażemy, że $H(z)$ jest wielomianem, zwanym wielomianem Hermite'a[1]

[1] Charles Hermite 1822-1901

$H(z)$ zapisujemy w postaci szeregu potęgowego $H(z)=\sum_k a_k z^k$. Aby funkcja $H(z)$ była nieosobliwa w $z=0$, żądamy $k\geq 0$.

$$H''(z)-2zH'(z)+(\lambda-1)H(z)=0 \quad\Rightarrow\quad \sum_{k=0}\left(\underbrace{k(k-1)a_k z^{k-2}}_{=0\ \mathrm{dla}\ k=0,1}-2ka_k z^k+(\lambda-1)a_k z^k\right)=0$$

Zaczynając sumowanie pierwszego szeregu od $k=2$ dostajemy

$$\sum_{k=0}\big((k+2)(k+1)a_{k+2}+(-2k+\lambda-1)a_k\big)z^k=0$$

Żądając zachodzenia równania dla dowolnego z, dostajemy

$$(k+2)(k+1)a_{k+2}+(-2k+\lambda-1)a_k=0 \qquad\Rightarrow\qquad a_{k+2}=\frac{2k-\lambda+1}{(k+2)(k+1)}a_k \underset{k>>1}{\approx} \frac{2}{k}a_k$$

Porównajmy to z rozwinięciem funkcji e^{z^2} :

$$e^{z^2}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{z^{2n}}{n!}=\sum_{k=0,2,4...}^{\infty}\frac{z^k}{(k/2)!}=\sum_{k=0,2,4...}^{\infty}a_k z^k \quad\Rightarrow\quad a_k=\frac{1}{(k/2)!}$$

$$a_{k+2}=\frac{1}{(k/2+1)!}=\frac{1}{k/2+1}a_k \underset{k>>1}{\approx} \frac{2}{k}a_k$$

Widzimy, że jeśli szereg $H(z)=\sum_k a_k z^k$ nie obrywa się, to funkcja $H(z)$ zachowuje się jak funkcja e^{z^2}. Sprawiałoby to, że funkcja falowa $\psi(z)=e^{-\frac{z^2}{2}}H(z)$ zachowywałaby się jak funkcja $e^{\frac{z^2}{2}}$, co jest niefizyczne i przeczy znalezionemu już rozwiązaniu dla $z^2\to\infty$. A zatem szereg $H(z)=\sum_k a_k z^k$ musi się obrywać, czyli $H(z)$ <u>musi być wielomianem</u> stopnia n tzn. $H_n(z)=\sum_{k=0}^{n}a_k z^k$.

Podstawiając ten wielomian do równania $H''(z)-2zH'(z)+(\lambda-1)H(z)=0$ i żądając spełnienia równania dla każdego z dostajemy

$$(k+2)(k+1)a_{k+2}+(-2k+\lambda-1)a_k=0.$$

Dla $k=n$ mamy $(-2n+\lambda-1)a_n=0$, co daje $-2n+\lambda-1=0 \quad\Rightarrow\quad \lambda=2n+1$

Ponieważ $\lambda \equiv \dfrac{2E}{\hbar\omega}$, mamy

$$\boxed{E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega}$$

Energia oscylatora jest skwantowana, co jest skutkiem żądania znikania funkcji falowej dla $x = \pm\infty$.

Równanie na wielomian $H_n(z)$ przyjmuje postać

$$\boxed{H_n''(z) - 2zH_n'(z) + 2nH_n(z) = 0}$$

$H_0(z) = 1$
$H_1(z) = 2z$
$H_2(z) = 4z^2 - 2$

Jest to równanie na tzw. wielomiany Hermite'a dane wzorem

$$H_n(z) = (-1)^n e^{z^2} \frac{d^n}{dz^n} e^{-z^2}$$

Wielomiany Hermite'a są tak unormowane, że spełniają relację

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz\, H_n(z) H_m(z) e^{-z^2} = \delta^{nm} \sqrt{\pi}\, 2^n n!$$

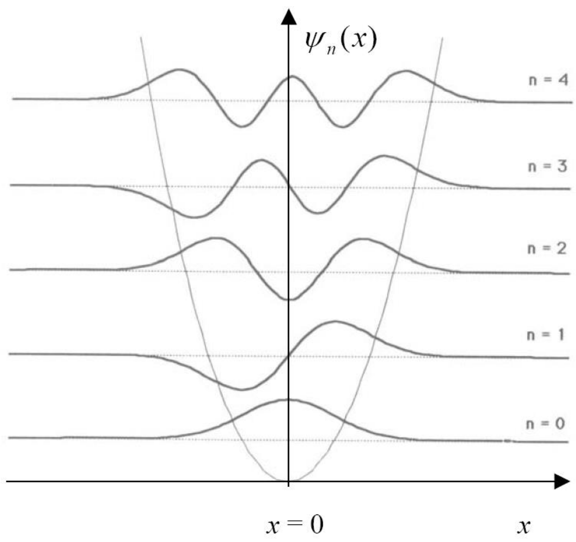
Funkcje falowe są postaci

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{a}{\sqrt{\pi}\, 2^n n!}}\, e^{-\frac{a^2x^2}{2}} H_n(ax),$$

gdzie $a \equiv \sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}$

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4} x e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$



Energia stanu podstawowego, zwana „energią drgań zerowych", $E_0 = \hbar\omega/2$ jest różna od zera, ponieważ spoczywanie na dnie potencjału wymagałoby doskonałej lokalizacji cząstki w punkcie $x = 0$. Energia drgań zerowych pojawia się więc jako kompromis między lokalizacją cząstki w przestrzeni położeń i w przestrzeni pędów. Aby się tym przekonać, rozłóżmy $\psi_0(x)$ na stany własne pędu, czyli obliczmy transformatę Fouriera $\psi_0(x)$.

Wykład VI cd. Mechanika kwantowa

$$\tilde{\psi}_0(k) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-ikx} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} = \sqrt{2}\left(\frac{\pi\hbar}{m\omega}\right)^{1/4} e^{-\frac{\hbar k^2}{2m\omega}}$$

Całkę fourierowską wykonujemy następująco:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{ikx} e^{-ax^2} = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-\left(\sqrt{a}x - \frac{ik}{2\sqrt{a}}\right)^2 - \frac{k^2}{4a}} \underset{t=\sqrt{a}x-\frac{ik}{2\sqrt{a}}}{=} \frac{e^{-\frac{k^2}{4a}}}{\sqrt{a}} \int_{-\infty-\frac{ik}{2\sqrt{a}}}^{\infty-\frac{ik}{2\sqrt{a}}} dt\, e^{-t^2} = \frac{e^{-\frac{k^2}{4a}}}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{-t^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}\, e^{-\frac{k^2}{4a}}$$

Rozkład położenia i rozkład wektora falowego w stanie podstawowym oscylatora są rozkładami Gaussa

$$|\psi_0(x)|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\, e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}, \text{ przy czym } \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_0(x)|^2 = 1$$

oraz

$$|\tilde{\psi}_0(k)|^2 = 2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}\, e^{-\frac{\hbar k^2}{m\omega}}, \text{ przy czym } \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{2\pi} |\tilde{\psi}_0(k)|^2 = 1.$$

Ponieważ wektor falowy k wiąże się z pędem p poprzez relację $p = \hbar k$, rozkład pędu ma postać

$$|\tilde{\psi}_0(p)|^2 = 2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}\, e^{-\frac{p^2}{m\omega\hbar}}, \text{ przy czym } \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} |\tilde{\psi}_0(p)|^2 = 1$$

Szerokości rozkładów położenia i pędu wynoszą:

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}, \quad \sigma_p = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \quad \Rightarrow \quad \sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2}$$

A więc iloczyn szerokości rozkładów polożenia i pędu przyjmuje najmniejszą możliwą wartość dopuszczalną przez zasadę nieoznaczoności.

Dygresja matematyczna – rozkład Gaussa

$$P(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} dx\, P(x) = 1,$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x\, P(x) = 0,$$

$$\left\langle \left(x - \langle x \rangle\right)^2 \right\rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, x^2 P(x) = \sigma^2 .$$