

## Wykład IX

## Podstawy fizyki kwantowej

### Oscylator harmoniczny

Rozważamy jednowymiarowy problem cząstki w potencjale harmonicznym  $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ , gdzie  $\omega$  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  $z = ax$ , dobierając parametr  $a$  tak, aby równanie Schrödingera przyjęło postać

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

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

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

Jeśli  $z^2 \rightarrow \infty$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## Wykład IX cd.

## Podstawy fizyki kwantowej

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

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

Zaczynając sumowanie pierwszego szeregu od  $k=2$  dostajemy

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

Żądając zachodzenia równania dla dowolnego  $z$ , dostajemy

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

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

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

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

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  $z^2 \rightarrow \infty$ . A zatem szereg  $H(z) = \sum_k a_k z^k$  musi się obrywać,

czyli  $H(z)$  musi być wielomianem 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  $-2n + \lambda - 1 = 0 \Rightarrow \lambda = 2n + 1$

## Wykład IX cd.

## Podstawy fizyki kwantowej

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

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

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

Równanie na wielomian  $H_n(z)$  przyjmuje postać

$$H_n''(z) - 2zH_n'(z) + 2nH_n(z) = 0$$

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

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

$$H_0(z) = 1$$

$$H_1(z) = 2z$$

$$H_2(z) = 4z^2 - 2$$

Wielomiany Hermite'a są tak unormowane, że spełniają relację

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

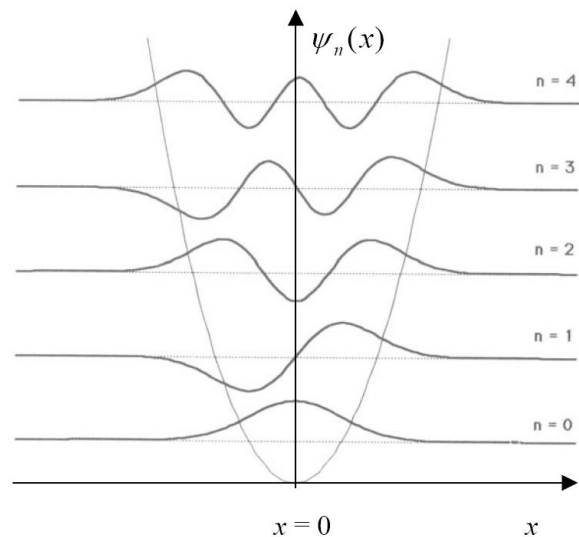
Funkcje falowe są postaci

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

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

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

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



Energia stanu podstawowego, zwana „energją 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 położen i w przestrzeni pędów. Aby się o tym przekonać, rozłóżmy  $\psi_0(x)$  na stany własne pędu, czyli obliczmy transformatę Fouriera  $\psi_0(x)$ .

## Wykład IX cd.

## Podstawy fizyki kwantowej

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

Całkę fourierowską wykonujemy następująco:

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

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:

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

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

### Dygresja matematyczna – rozkład Gaussa

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

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

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