

Rozdział 6

Ważny przykład – oscylator harmoniczny

6.1 Wprowadzenie

Klasyczny, jednowymiarowy oscylator harmoniczny odpowiada potencjałowi (energii potencjalnej):

$$V(x) = \frac{1}{2} kx^2. \quad (6.1)$$

Potencjał ten określa siłę działającą na oscylator

$$F_x = - \frac{dV(x)}{dx} = -kx, \quad (6.2)$$

zgodną z prawem Hooke’a. Zwróćmy w tym miejscu uwagę, że wiele potencjałów mających minimum, można w okolicach tego minimum przybliżyć potencjałem typu oscylatora. Jeżeli potencjał $\phi(x)$ ma minimum w punkcie x_0 , to można go w otoczeniu tego punktu rozwinąć w szereg Taylora

$$\phi(x) = \phi(x_0) + \frac{1}{2!} \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} \Big|_{x=x_0} \cdot (x - x_0)^2 + \dots \quad (6.3)$$

W rozwinięciu tym nie ma pierwszej pochodnej, bo z założenia potencjał $\phi(x)$ ma w x_0 minimum, więc $\phi'(x)|_{x=x_0} = 0$, zaś druga pochodna $\phi''(x)|_{x=x_0} > 0$. Dokonując zamiany zmiennych $y = x - x_0$, przeskalowując energie tak aby było $\phi(x_0) = 0$, oraz kładąc $\phi''(x)|_{x=x_0} = \frac{1}{2}k$ sprowadzamy problem (w przybliżeniu) do potencjału kwadratowego. Jest to jeden z powodów, dla których oscylator harmoniczny jest rzeczywiście ważnym przykładem.

Równanie ruchu oscylatora (newtonowskie) ma postać

$$m\ddot{x} + kx = 0, \quad (6.4)$$

które można też zapisać w postaci

$$\ddot{x} + \omega^2 x = 0, \quad \text{gdzie} \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (6.5)$$

Nietrudno jest też skonstruować klasyczny hamiltonian oscylatora:

$$\mathcal{H}_{kl} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (6.6)$$

Klasyczny oscylator (co łatwo pokazać) ma energię całkowitą niezależną od czasu (stałą ruchu), bowiem czas jest zmienną cykliczną (nie występuje jawnie w hamiltonianie (6.6)). Ponadto klasyczny ruch oscylatora jest przestrzennie ograniczony

$$x \in (-A, A), \quad \text{gdzie} \quad A - \text{amplituda}. \quad (6.7)$$

6.2 Stacjonarne równanie Schrödingera dla oscylatora harmonicznego

W poprzednich rozdziałach stwierdziliśmy, że rozwiązanie równania Schrödingera w gruncie rzeczy sprowadza się do znalezienia rozwiązań tzw. stacjonarnego równania Schrödingera, czyli do zagadnienia własnego dla hamiltonianu rozważanego układu fizycznego. Operator Hamiltona dla kwantowo-mechanicznego oscylatora harmonicznego skonstruujemy za pomocą zasady odpowiedniości. Bierzemy hamiltonian klasyczny (6.6), w którym pęd i współrzędne zastępujemy operatorami położenia i pędu. Otrzymujemy więc operator

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2, \quad (6.8)$$

bowiem $\hat{p} = -(i\hbar)d/dx$, (mamy tu przypadek jednowymiarowy), zaś działanie operatora położenia \hat{x} polega na mnożeniu funkcji falowej przez odpowiednią funkcję. Wobec tego stacjonarne równanie Schrödingera dla oscylatora ma postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi(x) = E\psi(x). \quad (6.9)$$

Ponieważ ograniczamy się do jednego wymiaru, więc funkcja falowa (w problemie stacjonarnym) zależy jedynie od współrzędnej x .

Uwaga. Na gruncie kwantowo-mechanicznym nie ma *a priori* żadnego powodu ograniczać obszar zmienności współrzędnej x . A więc mamy $x \in \mathbb{R}$.

Równanie (6.9) jest równanie różniczkowym, można więc odwołać się do teorii równań różniczkowych i dokonać ogólnej dyskusji hamiltonianu (6.8) i rozwiązań zagadnienia własnego (6.9). Nie będziemy jednak tego robić. Poprzestaniemy na stwierdzeniu dwóch faktów.

- Wartości własne energii są dodatnie, co wynika także z analogii klasycznej. Wynik ten otrzymamy zresztą jako rezultat bezpośrednich obliczeń.
- Funkcje własne hamiltonianu (6.8) mają określoną parzystość, tzn. funkcje własne są albo parzyste albo nieparzyste. Zbiór funkcji własnych rozpada się na dwie klasy. Fakt ten jest konsekwencją parzystości potencjału $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. Ta własność równania Schrödingera omawiana jest w *Uzupełnieniach*.

Rozwiązanie zagadnienia własnego (6.9) podzielimy na etapy. Szukamy rozwiązań następującego równania różniczkowego,

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2 \right) \psi(x) = 0, \quad (6.10)$$

które w oczywisty sposób wynika z (6.9). Funkcje falowe spełniające to równanie muszą spełniać warunki fizyczne, jakim jest na przykład żądanie aby funkcje te były normowalne w kwadracie (interpretacja probabilistyczna).

6.2.1 Zamiana zmiennych

Dyskutując różne zagadnienia fizyczne wielokrotnie potrzebujemy określenia, czy dana wielkość fizyczna jest duża czy mała. Aby móc coś takiego stwierdzić musimy mieć odpowiednią skalę porównawczą. Stwierdzenie, że masa atomu jest mała nie bardzo ma sens, bowiem jest ona rzeczywiście mała w porównaniu z pyłkiem kurzu, lecz duża w porównaniu z masą elektronu. Ewidentnie potrzebujemy skali porównawczej. Jednym ze sposobów jest znalezienie skal, naturalnych

dla danego problemu fizycznego. Omówimy to na przykładzie skali długości naturalnej dla kwantowo-mechanicznego oscylatora harmonicznego opisywanego równaniem Schrödingera (6.9) lub (6.10). Oscylator jest scharakteryzowany trzema parametrami: m , ω i \hbar (mechanika kwantowa!). Z tych trzech parametrów konstruujemy wielkość o wymiarze długości. Musimy więc mieć

$$[dług.] = m^a \omega^b \hbar^c, \quad (6.11)$$

gdzie wykładniki a , b i c są liczbami rzeczywistymi. Ponieważ

$$[m] = \text{kg}, \quad [\omega] = \frac{1}{\text{s}}, \quad [\hbar] = \text{J} \cdot \text{s} = \frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}} \quad (6.12)$$

więc warunek (6.12) sprowadza się do

$$[dług.] = \text{kg}^a \left(\frac{1}{\text{s}}\right)^b \left(\frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2}{\text{s}}\right)^c = (\text{kg})^{a+c} \text{m}^{2c} \text{s}^{-b-c}. \quad (6.13)$$

Żądamy zgodności wymiarów, skąd wynika układ równań na wykładniki

$$a + c = 0, \quad -b - c = 0 \quad 2c = 1. \quad (6.14)$$

Stąd zaś mamy od razu $c = \frac{1}{2}$, $a = -\frac{1}{2}$ i $b = -\frac{1}{2}$. Wracając do równania (6.11) otrzymujemy

$$[dług.] = m^{-1/2} \omega^{-1/2} \hbar^{1/2} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}. \quad (6.15)$$

Jest to właśnie poszukiwana naturalna "jednostka" długości charakteryzująca kwantowo-mechaniczny oscylator harmoniczny.

Wprowadzamy nową, bezwymiarową zmienną

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x. \quad (6.16)$$

Wynikają stąd dwie korzyści. Po pierwsze, teorie matematyczne (a więc i teoria równań różniczkowych) dotyczą zmiennych bezwymiarowych. Po drugie, nabierają teraz sensu stwierdzenia typu $\xi \gg 1$, co oznacza, że odpowiednia współrzędna x przyjmuje wartości znacznie większe niż naturalna jednostka (6.15).

Szukamy rozwiązania w funkcji nowej zmiennej. Z definicji (6.16) wynikają relacje

$$\frac{d}{dx} = \frac{d\xi}{dx} \frac{d}{d\xi} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{d\xi}, \quad (6.17a)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} = \frac{d\xi}{dx} \frac{d}{d\xi} \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{d\xi} \right) = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{d\xi^2}. \quad (6.17b)$$

Posługując się powyższymi relacjami w równaniu (6.10) i skracając pojawiający się czynnik $m\omega/\hbar$, otrzymujemy równanie w zmiennej ξ

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + (\mathcal{E} - \xi^2) \psi(\xi) = 0, \quad (6.18)$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie dla energii przeskalowanej do wielkości bezwymiarowej

$$\mathcal{E} = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (6.19)$$

Widzimy więc, że naturalną jednostką energii dla oscylatora jest więc iloczyn $\hbar\omega$. Oczywiście równanie (6.18) ma nadal strukturę zagadnienia własnego, tyle że w zmiennych bezwymiarowych. Poszukiwane funkcje falowe w zmiennej x wyrażają się teraz (w myśl dokonanej zamiany zmiennych) wzorem

$$\psi(x) = \psi(\xi) = \psi\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right), \quad (6.20)$$

o czym należy pamiętać, bowiem zmierzamy do konstrukcji funkcji falowych jako funkcji współrzędnej x .

6.2.2 Zachowanie asymptotyczne

Funkcje falowe, będące rozwiązaniami równania Schrödingera muszą być całkowalne w kwadracie, oczekujemy więc, że dla dużych bezwzględnych wartości argumentu powinny zbiegać do zera. Aby to zbadać rozważymy równanie (6.18) dla dużych wartości zmiennej, tzn. dla takich, że $(\xi \gg \mathcal{E})$, gdy wartość własna \mathcal{E} w równaniu (6.18) jest zaniedbywalna. Wobec tego, w przybliżeniu, mamy równanie

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2\psi(\xi) \approx 0. \quad (6.21)$$

Łatwo jest zgadnąć przybliżone rozwiązanie tego równania. Mianowicie

$$\psi(\xi) \approx \exp\left(\pm \frac{1}{2}\xi^2\right), \quad (6.22)$$

jest takim rozwiązaniem. Istotnie, przez proste różniczkowanie mamy

$$\frac{d\psi(\xi)}{d\xi} = \pm \xi\psi(\xi), \quad \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} = \pm \psi(\xi) + \xi^2\psi(\xi). \quad (6.23)$$

Dla dużych ξ pierwszy człon w drugiej pochodnej jest zaniedbywalny w porównaniu z drugim. Funkcja (6.22) spełnia więc w przybliżeniu asymptotyczne równanie (6.21). Funkcja falowa musi być normowalna. Wobec tego, matematycznie dopuszczalne rozwiązanie $\exp(+\xi^2/2)$, jest fizycznie nie do przyjęcia. A zatem, jako przybliżone rozwiązanie dla dużych ξ przyjmujemy

$$\psi(\xi) \approx \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right), \quad (6.24)$$

które można unormować.

Funkcja (6.24) jest rozwiązaniem przybliżonym, zadowalającym dla dużych ξ . Potrzebujemy rozwiązania ścisłego. Postulujemy więc rozwiązanie równania (6.18) w postaci

$$\psi(\xi) = \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) f(\xi), \quad (6.25)$$

gdzie $f(\xi)$ jest funkcją, którą trzeba znaleźć. Zanim przystąpimy do poszukiwania $f(\xi)$, poczynimy na jej temat pewne uwagi. Funkcja falowa musi być normowalna, a więc funkcja $f(\xi)$ musi być taka, aby

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\xi \left| \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) f(\xi) \right|^2 < \infty. \quad (6.26)$$

(Skoro funkcja falowa $\psi(x)$ ma być normowalna, to to samo dotyczy normowalności w zmiennej ξ , bowiem obie zmienne są wzajemnie proporcjonalne.) Wnioskujemy więc, że funkcja $f(\xi)$ musi

być "przyzwoita". Wiadomo, że funkcja $\exp(-\xi^2/2)$ wygasa dla dostatecznie dużych ξ dowolny wielomian. Można by więc z góry żądać, aby $f(\xi)$ była wielomianem. Wykażemy dalej, że tak jest istotnie, bez żadnych założeń wstępnych.

Zauważmy jeszcze, że może się wydawać, iż matematycznie poprawne rozwiązanie asymptotyczne $\exp(+\frac{1}{2}\xi^2)$ zostało odrzucone. Jak się okaże, wcale ono nie "znikło". Rzeczywiście definitywne ograniczenie się do rozwiązań należących do klasy funkcji normowalnych nastąpi później. Postulat (6.25) traktujemy więc jako pomocniczy.

6.2.3 Równanie dla funkcji $f(\xi)$

Funkcja (6.25) ma ściśle spełniać równanie (6.18). Podstawiamy więc (6.25) do (6.18). Różniczkując, otrzymujemy (prim oznacza pochodną względem argumentu)

$$\psi'(\xi) = \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) [-\xi f(\xi) + f'(\xi)], \quad (6.27a)$$

$$\psi''(\xi) = \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) [\xi^2 f(\xi) - f(\xi) - 2\xi f'(\xi) + f''(\xi)]. \quad (6.27b)$$

Po podstawieniu obliczonych pochodnych do równania (6.18), uproszczeniu wspólnego czynnika wykładniczego i elementarnym skróceniu, otrzymujemy

$$f''(\xi) - 2\xi f'(\xi) + (\mathcal{E} - 1)f(\xi) = 0, \quad (6.28)$$

które stanowi poszukiwane równanie dla nieznanej funkcji $f(\xi)$.

Odnótujmy jeszcze, że "wyjściowa" funkcja falowa $\psi(x)$, wyrażona w zmiennej ξ za pomocą wzoru (6.20), przyjmuje teraz postać

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right) f\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right). \quad (6.29)$$

Dalsze kroki rozwiązania można przeprowadzić na różne sposoby. Przedstawimy tutaj jeden z nich. Drugi sposób znaleźć można w *Uzupełnieniach*.

6.3 Rozwiązanie via konfluentna funkcja hipergeometryczna

6.3.1 Konfluentne równanie hipergeometryczne. Rozwiązanie

Dalej analizując równanie (6.28) wprowadzimy jeszcze jedną zmienną pomocniczą

$$y = \xi^2 \implies \frac{d}{d\xi} = \frac{dy}{d\xi} \frac{d}{dy} = 2\xi \frac{d}{dy}. \quad (6.30)$$

Dla drugiej pochodnej analogicznie otrzymujemy

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{d\xi^2} &= \frac{d}{d\xi} \frac{d}{d\xi} = \frac{d}{d\xi} \left(2\xi \frac{d}{dy} \right) = 2\xi \frac{d}{d\xi} \frac{d}{dy} + 2 \frac{d}{dy} \\ &= 2\xi \frac{dy}{d\xi} \frac{d^2}{dy^2} + 2 \frac{d}{dy} = 4\xi^2 \frac{d^2}{dy^2} + 2 \frac{d}{dy} = 4y \frac{d^2}{dy^2} + 2 \frac{d}{dy}. \end{aligned} \quad (6.31)$$

Po dokonaniu takiej zamiany zmiennych równanie (6.28) przybiera postać

$$\left(4y \frac{d^2}{dy^2} + 2 \frac{d}{dy} \right) f(y) - 2\xi \cdot 2\xi \frac{d}{dy} f(y) + (\mathcal{E} - 1) f(y) = 0. \quad (6.32)$$

Uporządkowanie tego równania prowadzi do

$$y \frac{d^2}{dy^2} f(y) + \left(\frac{1}{2} - y \right) \frac{d}{dy} f(y) + \frac{(\mathcal{E} - 1)}{4} f(y) = 0, \quad (6.33)$$

które ma dokładnie postać konfluentnego równania hipergeometrycznego

$$z \frac{d^2 u(z)}{dz^2} + (c - z) \frac{du(z)}{dz} - au(z) = 0, \quad (6.34)$$

Podstawowe własności tego równania omówione są w *Dodatkach matematycznych*, a więc nie ma potrzeby ich tu powtarzać. Dla skrócenia notacji, oznaczmy konfluentną funkcję hipergeometryczną jako

$$\Phi(a, c, z) \equiv {}_1F_1(a, c, z). \quad (6.35)$$

Porównując równanie (6.33) z ogólnym równaniem stwierdzamy, że parametry naszego równania hipergeometrycznego są następujące

$$a = -\frac{\mathcal{E} - 1}{4} = \frac{1 - \mathcal{E}}{4}, \quad c = \frac{1}{2}, \quad (\text{niecałkowite}). \quad (6.36)$$

Możemy więc, korzystając z ogólnych wzorów, zapisać rozwiązania równania (6.33) za pomocą funkcji Φ . Zauważmy przy tym, że

$$1 - c = \frac{1}{2}, \quad a - c + 1 = -\frac{\mathcal{E}}{4} + \frac{3}{4} \quad (6.37)$$

A zatem ogólne rozwiązanie równania (6.33) dla $f(y)$ to kombinacja liniowa

$$f(y) = C \Phi\left(\frac{1 - \mathcal{E}}{4}, \frac{1}{2}, y\right) + D y^{1/2} \Phi\left(\frac{3 - \mathcal{E}}{4}, \frac{3}{2}, y\right), \quad (6.38)$$

gdzie C i D stanowią stałe dowolne (na razie nieokreślone). Oczywiście uzyskane wyniki wymagają dalszej dyskusji o bardziej fizycznym charakterze (a także normowania).

6.3.2 Dyskusja rozwiązań

Wracając w ogólnym rozwiązaniu (6.38) do zmiennej ξ mamy więc

$$f(\xi) = C \Phi\left(\frac{1 - \mathcal{E}}{4}, \frac{1}{2}, \xi^2\right) + D \xi \Phi\left(\frac{3 - \mathcal{E}}{4}, \frac{3}{2}, \xi^2\right). \quad (6.39)$$

Zwróćmy od razu uwagę, że skoro funkcja $\Phi(a, c, z)$ jest określona za pomocą rozwinięcia w szereg, to pierwszy składnik w (6.39) (proporcjonalny do C) jest funkcją parzystą argumentu ξ , zaś drugi (proporcjonalny do D) jest funkcją nieparzystą. Przypominamy, że szukamy funkcji falowej w postaci $\psi(x) = \exp(-\xi^2/2)f(\xi)$, gdzie $\xi = \sqrt{m\omega/\hbar} x$.

Z własności asymptotycznych konfluentnej funkcji hipergeometrycznej wynika, że rozwiązania dla $|\xi| \rightarrow \infty$ zachowują się (z dokładnością do stałej) jak

$$f(\xi) \xrightarrow{|\xi| \rightarrow \infty} \exp(\xi^2) (\xi^2)^{a-c}, \quad (6.40)$$

przy czym w pierwszym członie $a = (1 - \mathcal{E})/4$ oraz $c = 1/2$, natomiast w drugim $a = (3 - \mathcal{E})/4$ oraz $c = 3/2$. Ponieważ funkcję falową otrzymujemy mnożąc $f(\xi)$ przez $\exp(-\xi^2/2)$, więc widzimy, że otrzymane funkcje są nienormowalne, bowiem znów pojawia się asymptotyczne (duże $|\xi|$) rozwiązanie postaci $\exp(+\frac{1}{2}\xi^2)$. Uniknięcie tej trudności jest możliwe tylko wtedy, gdy szeregi przedstawiające funkcję Φ urywają się, a więc redukują się do wielomianów, co zachodzi wtedy, gdy pierwszy parametr funkcji Φ jest ujemną liczbą całkowitą.

Potencjał oscylatora jest funkcją parzystą, a więc funkcje własne hamiltonianu tworzą dwie klasy: funkcji parzystych i nieparzystych. Rozważmy więc dwa oddzielne przypadki.

Rozwiązania parzyste

Rozwiązania parzyste "siedzą" w pierwszych członie funkcji (6.39). Przyjmiemy więc $C \neq 0$ oraz $D = 0$, i wówczas mamy

$$f(\xi) = C \Phi\left(\frac{1-\mathcal{E}}{4}, \frac{1}{2}, \xi^2\right). \quad (6.41)$$

Szereg się urywa, jeżeli spełniony jest warunek

$$\frac{1-\mathcal{E}}{4} = -n, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (6.42)$$

Wobec tego oczywiście mamy $\mathcal{E} = 4n + 1$. Według oznaczenia (6.19) otrzymujemy

$$\frac{2E}{\hbar\omega} = 4n + 1 \quad \Rightarrow \quad E = \hbar\omega \left(2n + \frac{1}{2}\right), \quad (6.43)$$

co oczywiście stanowi warunek kwantowania energii.

Rozwiązania nieparzyste

Rozwiązanie nieparzyste to drugi składnik w (6.39). Przyjmiemy teraz $C = 0$ oraz $D \neq 0$. W tym przypadku mamy

$$f(\xi) = D \xi \Phi\left(\frac{3-\mathcal{E}}{4}, \frac{3}{2}, \xi^2\right). \quad (6.44)$$

I teraz szereg się urywa, jeżeli spełniony jest warunek

$$\frac{3-\mathcal{E}}{4} = -n, \quad n = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (6.45)$$

Tym razem więc mamy $\mathcal{E} = 4n + 3$. Ponownie w/g oznaczeń (6.19) dostajemy

$$\frac{2E}{\hbar\omega} = 4n + 3 \quad \Rightarrow \quad E = \hbar\omega \left(2n + 1 + \frac{1}{2}\right), \quad (6.46)$$

co oczywiście stanowi drugi warunek kwantowania energii.

Podsumowanie

Podsumowując możemy stwierdzić, że uzyskaliśmy rozwiązania stacjonarnego równania Schrödingera (zagadnienia własnego dla energii) dla oscylatora harmonicznego

$$\psi(x) = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) f(\xi) \quad \text{gdzie} \quad \xi = x \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}. \quad (6.47)$$

Funkcje falowe i energia dla rozwiązań parzystych

$$\psi_N(x) = \psi_{2n}(x) = C \cdot \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \Phi\left(-n, \frac{3}{2}, \xi^2\right), \quad (6.48a)$$

$$E_N = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2}\right), \quad N = 2n, (n = 1, 2, \dots). \quad (6.48b)$$

Funkcje falowe i energia dla rozwiązań nieparzystych

$$\psi_N(x) = \psi_{2n+1}(x) = D \xi \cdot \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \Phi\left(-n, \frac{1}{2}, \xi^2\right), \quad (6.49a)$$

$$E_N = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2}\right), \quad N = 2n + 1, (n = 1, 2, \dots). \quad (6.49b)$$

Wielomiany Hermite

Występujące tu konfluentne funkcje hipergeometryczne można powiązać z wielomianami Hermite'a

$$\Phi\left(-n, \frac{1}{2}, z^2\right) = (-1)^n \frac{n!}{(2n)!} H_{2n}(z), \quad (6.50a)$$

$$2z \Phi\left(-n, \frac{3}{2}, z^2\right) = (-1)^n \frac{n!}{(2n+1)!} H_{2n+1}(z). \quad (6.50b)$$

Włączając współczynniki liczbowe do stałych normalizacyjnych (które obliczymy później) możemy rozwiązania parzyste i nieparzyste zapisać odpowiednio w postaci

$$\psi_{2n}(x) = N_{2n} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_{2n}(\xi), \quad E_{2n} = \hbar\omega\left(2n + \frac{1}{2}\right), \quad (6.51a)$$

$$\psi_{2n+1}(x) = N_{2n+1} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_{2n+1}(\xi), \quad E_{2n+1} = \hbar\omega\left(2n + 1 + \frac{1}{2}\right) \quad (6.51b)$$

Oczywiście rozwiązania te możemy połączyć, kładąc $k = 2n$ dla rozwiązań parzystych i $k = 2n+1$ dla nieparzystych. Mamy wtedy

$$\psi_k(x) = N_k \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H_k(\xi), \quad (6.52a)$$

$$E_k = \hbar\omega\left(k + \frac{1}{2}\right) \quad (6.52b)$$

gdzie $k = 1, 2, \dots$, a także $\xi = x \sqrt{m\omega/\hbar}$. Zwróćmy uwagę, że zbiór wartości własnych energii tworzy "drabinkę" równoodległych poziomów, a odległości pomiędzy nimi są równe $\hbar\omega$. Nieprzypadkowo więc iloczyn $\hbar\omega$ stanowi naturalną jednostkę energii oscylatora.

Oczywiście rezultaty uzyskane tu, są w pełni zgodne z wynikami otrzymanymi w *Uzupełnieniach* za pomocą zupełnie innych metod rachunkowych.

6.3.3 Wielomiany Hermite'a. Funkcje własne

Hipergeometryczna funkcja konfluentna, choć pożyteczna w obliczeniach, mniej przemawia do wyobraźni niż wielomiany Hermite'a. Dlatego też w dalszej dyskusji konsekwentnie posługujemy się tymi wielomianami. Najważniejsze własności wielomianów Hermite'a są przedstawione w *Dodatkach matematycznych*. Podamy tu tylko kilka faktów, z których będziemy korzystać.

Wielomiany Hermite'a spełniają (dla $n \geq 1$) relacje rekurencyjne

$$H_{n+1}(x) = 2x H_n(x) - 2n H_{n-1}(x), \quad (6.53a)$$

$$\frac{d}{dx} H_n(x) = 2n H_{n-1}(x). \quad (6.53b)$$

Spełniają także następującą relację ortogonalności

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm}. \quad (6.54)$$

Nietrudno jest też sprawdzić, że wielomiany Hermite'a spełniają równanie różniczkowe

$$f''(\xi) - 2\xi f'(\xi) + 2nf(\xi) = 0, \quad \text{dla} \quad f(x) = H_n(x). \quad (6.55)$$

Równanie to jest formalnie identyczne z naszym równaniem (6.28), w którym zamiast parametru $(\mathcal{E} - 1)$ położyć trzeba $2n$ (n całkowite), zgodnie z warunkiem (6.52b). Moglibyśmy od razu

żądać, aby rozwiązaniem równania (6.28) były wielomiany. Jest to możliwe tylko wtedy, gdy $(\mathcal{E} - 1) = 2n$. A więc moglibyśmy w ten sposób otrzymać zarówno poszukiwane funkcje falowe $\psi_n(\xi)$, jak i warunek kwantowania. Postępowanie takie jest jednak mało eleganckie. O funkcji $f(\xi)$ spełniającej równanie (6.28) wiemy, że musi spełniać warunek normowalności (6.26), z czego nie wynika jednoznacznie, że $f(\xi)$ jest wielomianem.

Normowanie funkcji falowych

Funkcje falowe (6.52a) w zmiennej x mają postać

$$\psi(x) = \psi_n(x) = N_n \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right). \quad (6.56)$$

Pozostaje określić stałą N_n , którą wyznaczymy z warunku normowania

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2. \quad (6.57)$$

Przypominamy, że całkowanie odbywa się po całej przestrzeni, nie ma tu bowiem żadnych ograniczeń na zmienną x . Wstawiamy więc funkcję falową (6.56) do warunku (6.57) i musimy obliczyć całkę

$$1 = |N_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right). \quad (6.58)$$

Wprowadzamy nową zmienną całkowania $y = x\sqrt{m\omega/\hbar}$. Zatem z (6.58) mamy

$$1 = |N_n|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} H_n(y) H_n(y). \quad (6.59)$$

Całka po prawej, to nic innego niż całka ortogonalizacyjna wielomianów Hermite'a (6.54), wobec tego otrzymujemy

$$1 = |N_n|^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \cdot 2^n n! \sqrt{\pi}, \quad \Rightarrow \quad |N_n|^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{2^n n!}. \quad (6.60)$$

Wybierając fazę równą zeru, otrzymujemy finalnie

$$N_n = \left[\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right]^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}. \quad (6.61)$$

6.3.4 Podsumowanie: funkcje i energie własne oscylatora

Hamiltonian (6.8) jednowymiarowego kwantowo-mechanicznego oscylatora harmonicznego ma następujące funkcje własne

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right). \quad (6.62)$$

Funkcje te odpowiadają energiom

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad (6.63)$$

gdzie $n = 1, 2, 3, \dots$. Przypomnijmy, że kwantowanie energii jest warunkiem otrzymania normowalnych, a więc fizycznie akceptowalnych, rozwiązań stacjonarnego równania Schrödingera.

Kwantowanie energii jest więc konsekwencją narzucenia warunków fizycznych na matematycznie możliwe do otrzymania rozwiązania.

Ogólna funkcja falowa oscylatora harmonicznego jest kombinacją liniową stanów własnych (6.62), które tworzą bazę w przestrzeni stanów. Wobec tego, dla dowolnego stanu oscylatora mamy funkcję falową

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(x), \quad \sum_{n=0}^{\infty} |c_n|^2 = 1. \quad (6.64)$$

Współczynniki c_n są na ogół zespolone. Drugie równanie stanowi więc warunek unormowania dowolnej funkcji falowej. Wielkości c_n są amplitudami prawdopodobieństwami tego, że w wyniku pomiaru energii oscylatora opisanego funkcją falową (6.64), otrzymamy energię E_n daną wzorem (6.63).

6.4 Pewne zastosowania

Oscylator harmoniczny jest (często tylko przybliżonym) modelem wielu układów fizycznych. Otrzymane (co ważniejsze ściśle) rozwiązania stacjonarnego równania Schrödingera dla oscylatora harmonicznego są więc często pożyteczne. Przedstawimy tu obliczenia pewnych elementów macierzowych operatorów związanych z oscylatorem.

6.4.1 Element macierzowy operatora położenia

Obliczymy element macierzowy operatora położenia, który z definicji, dany jest całką

$$\langle k | x | n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_k^*(x) x \psi_n(x). \quad (6.65)$$

Biorąc z (6.62) funkcje własne oscylatora harmonicznego, otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle k | x | n \rangle = & \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \sqrt{\frac{1}{2^k k! 2^n n!}} \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) \\ & \times H_k\left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) x H_n\left(x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right). \end{aligned} \quad (6.66)$$

Dokonujemy zamiany zmiennych

$$y = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \Rightarrow x = y \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad \text{zatem} \quad dy = dx \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad (6.67)$$

wobec czego całka powyższa przyjmuje postać

$$\langle k | x | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \frac{H_k(y) y H_n(y)}{\sqrt{\pi} 2^k k! 2^n n!} e^{-y^2} \quad (6.68)$$

Zwróćmy uwagę, że przed całą pojawia się naturalna długość (6.15), a funkcja podcałkowa jest bezwymiarowa. Obliczenia elementu macierzowego operatora położenia (dla oscylatora harmonicznego) sprowadziliśmy więc do

$$\langle k | x | n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{1}{\sqrt{\pi} 2^k k! 2^n n!} I_{kn}^{(1)}, \quad (6.69)$$

gdzie $I_{kn}^{(1)}$ oznacza całkę

$$I_{kn}^{(1)} = \int_{-\infty}^{\infty} dy H_k(y) H_n(y) y e^{-y^2}, \quad (6.70)$$

Obliczenia powyższej całki są przedstawione w *Dodatkach matematycznych*. Na podstawie formuły (B.39) lub (B.44) korzystając z własności delt Kroneckera otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle k | x | n \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\pi} 2^k k! 2^n n!} \left[2^n (n+1)! \delta_{n,k-1} + 2^{n-1} n! \delta_{n,k+1} \right] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\sqrt{\frac{2^n (n+1)^2 n!}{2^k k!}} \delta_{n,k-1} + \sqrt{\frac{2^n n!}{2^2 2^k k!}} \delta_{n,k+1} \right] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\sqrt{\frac{2^n (n+1)! (n+1)}{2^{n+1} (n+1)!}} \delta_{n,k-1} + \sqrt{\frac{2^n n!}{2^2 2^{n-1} (n-1)!}} \delta_{n,k+1} \right] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{n,k-1} + \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{n,k+1} \right] \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{k,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{k,n+1} \right] \end{aligned} \quad (6.71)$$

co stanowi końcowy rezultat. Wartość oczekiwana położenia dla oscylatora znajdującego się w stanie własnym energii ψ_n , wynikająca z powyższego wzoru wynosi

$$\langle x \rangle = \langle n | x | n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) x \psi_n(x) = 0, \quad (6.72)$$

czego mnożna by od razu oczekiwać, bowiem funkcje $\psi_n(x)$ mają określoną parzystość, zatem funkcja podcałkowa jest nieparzysta, więc całka musi zniknąć.

6.4.2 Element macierzowy operatora pędu

W tym wypadku, bezpośrednio z definicji mamy

$$\langle k | p | n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_k^*(x) \hat{p} \psi_n(x) = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_k^*(x) \frac{d}{dx} \psi_n(x). \quad (6.73)$$

Podstawiamy funkcje własne oscylatora harmonicznego z (6.62) i dostajemy

$$\begin{aligned} \langle k | p | n \rangle &= -i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{\pi}} \sqrt{\frac{1}{2^k k! 2^n n!}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) H_k\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) \\ &\quad \times \frac{d}{dx} \left[\exp\left(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}\right) H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right) \right]. \end{aligned} \quad (6.74)$$

Ponownie dokonujemy zamiany zmiennej całkowania zgodnie z (6.67). Wobec tego

$$\begin{aligned} \langle k | p | n \rangle &= -i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{\pi}} \sqrt{\frac{1}{2^k k! 2^n n!}} \int_{-\infty}^{\infty} dy \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \exp\left(-\frac{1}{2} y^2\right) H_k(y) \\ &\quad \times \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{dy} \left[\exp\left(-\frac{1}{2} y^2\right) H_n(y) \right] \\ &= -i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{\pi 2^k k! 2^n n!}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} H_k(y) \left[-y H_n(y) + \frac{dH_n(y)}{dy} \right]. \end{aligned} \quad (6.75)$$

Na mocy relacji rekurencyjnej (6.53b) eliminujemy pochodną wielomianu Hermite’a

$$\langle k | p | n \rangle = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{\pi 2^k k! 2^n n!}} \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-y^2} H_k(y) [y H_n(y) - 2n H_{n-1}(y)]. \quad (6.76)$$

Jest to suma dwóch całek. Pierwszą z nich rozpoznajemy jako całkę $I_{kn}^{(1)}$ obliczoną w (B.39), druga zaś to po prostu całka ortogonalizacyjna (6.54). Wobec tego piszemy

$$\begin{aligned} \langle k | p | n \rangle = i \sqrt{m\omega\hbar} & \left[\sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{k,n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{k,n+1} \right. \\ & \left. - \frac{2n}{\sqrt{\pi 2^k k! 2^n n!}} \sqrt{\pi} 2^k k! \delta_{k,n-1} \right]. \end{aligned} \quad (6.77)$$

Porządkujemy czynnik w trzecim składniku korzystając z delty Kroneckera

$$-2n \sqrt{\frac{2^k k!}{2^n n!}} \delta_{k,n-1} = -2n \sqrt{\frac{1}{2n}} \delta_{k,n-1} = -2 \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{k,n-1}. \quad (6.78)$$

Wobec tego z (6.77) otrzymujemy

$$\langle k | p | n \rangle = i \sqrt{m\omega\hbar} \left[\sqrt{\frac{n+1}{2}} \delta_{k,n+1} - \sqrt{\frac{n}{2}} \delta_{k,n-1} \right], \quad (6.79)$$

co stanowi poszukiwany element macierzowy operatora pędu. Zwróćmy uwagę, że otrzymany rezultat jest czysto urojony, co może wydawać się niepokojące, bowiem pęd jest obserwabłą fizyczną. Nie ma jednak powodu do niepokoju, bowiem element macierzowy nie jest wielkością mierzalną. Taką jest wartość oczekiwana $\langle n | p | n \rangle$, która, ze względu na obecność delt Kroneckera, zeruje się. Można się o tym przekonać także w inny sposób. Wartość oczekiwana pędu dla oscylatora w stanie własnym energii dana jest jako

$$\langle p \rangle = \langle n | p | n \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_n^*(x) \frac{d}{dx} \psi_n(x) = 0, \quad (6.80)$$

bowiem $\psi_n(x)$ i jej pochodna mają odwrotne parzystości. Funkcja podcałkowa jest znów nieparzysta i całka znika.

6.4.3 Elementy macierzowe $\langle k | \hat{x}^2 | n \rangle$ oraz $\langle k | \hat{p}^2 | n \rangle$

Elementy te można obliczyć posługując się tymi samymi metodami rachunkowymi, które stosowaliśmy powyżej. Ze względu na kwadraty położenia i pędu obliczenia są nieco bardziej żmudne, choć nie powinny przedstawiać trudności koncepcyjnych. Na przykład obliczając $\langle k | \hat{x}^2 | n \rangle$ regułę rekurencyjną (6.53a) trzeba zastosować dwukrotnie. Nie będziemy tu przedstawiać niezbędnych obliczeń, a jedynie podamy końcowe rezultaty. Element macierzowy kwadratu operatora położenia ma postać

$$\langle k | \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left[\left(n + \frac{1}{2}\right) \delta_{k,n} + \sqrt{\frac{n(n-1)}{4}} \delta_{k,n-2} + \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}} \delta_{k,n+2} \right] \quad (6.81)$$

Natomiast element macierzowy kwadratu operatora pędu to

$$\langle k | \hat{p}^2 | n \rangle = m\omega\hbar \left[\left(n + \frac{1}{2}\right) \delta_{k,n} - \sqrt{\frac{n(n-1)}{4}} \delta_{k,n-2} - \sqrt{\frac{(n+1)(n+2)}{4}} \delta_{k,n+2} \right] \quad (6.82)$$

6.4.4 Zasada nieoznaczoności i energia stanu podstawowego

Dyskutując zasadę nieoznaczoności położenie–pęd stwierdziliśmy, że nie istnieją takie stany kwantowo-mechaniczne, w których znikają jednocześnie dyspersje położenia i pędu. Zbadajmy sytuację dla oscylatora harmonicznego znajdującego się w jednym ze stanów własnych $\psi_n(x)$. Wykazaliśmy (por. (6.72) i (6.80)), że wartości oczekiwane położenia i pędu wówczas znikają, tj. $\langle n|x|n\rangle = \langle n|p|n\rangle = 0$. I dalej, na podstawie wzorów (6.81) i (6.82), w których kładziemy $k = n$, mamy kolejne wartości oczekiwane

$$\langle n|x^2|n\rangle = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad \langle n|p^2|n\rangle = m\omega\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (6.83)$$

Łatwo obliczamy dyspersje

$$\sigma_n^2(x) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (6.84a)$$

$$\sigma_n^2(p) = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = m\omega\hbar \left(n + \frac{1}{2}\right). \quad (6.84b)$$

Wobec tego ich iloczyn wynosi

$$\sigma_n^2(x) \sigma_n^2(p) = \hbar^2 \left(n + \frac{1}{2}\right)^2, \quad (6.85)$$

gdzie indeks n mówi, że rozważamy stan własny ψ_n energii (hamiltonianu) oscylatora harmonicznego. Ponieważ $n \geq 0$, więc widzimy, że dla oscylatora znajdującego się w stanie własnym energii zachodzi nierówność

$$\sigma_n^2(x) \sigma_n^2(p) \geq \frac{\hbar^2}{4}, \quad (6.86)$$

co oznacza, że spełniona jest zasada nieoznaczoności. Ponadto, z relacji (6.85) jasno wynika, że w stanie podstawowym ($n = 0$) jest ona minimalizowana.

Co więcej, łatwo obliczamy wartość oczekiwaną energii (w stanie ψ_n):

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \langle n|\hat{H}|n\rangle = \frac{1}{2m} \langle n|\hat{p}^2|n\rangle + \frac{1}{2} m\omega^2 \langle n|\hat{x}^2|n\rangle \\ &= \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + n\right) = E_n. \end{aligned} \quad (6.87)$$

Nie jest to wynik nieoczekiwany, bo stan ψ_n jest stacjonarnym stanem własnym odpowiadającym właśnie energii własnej E_n . Wiemy zaś, że energia układu fizycznego znajdującego się w stanie stacjonarnym nie ulega zmianom.

Warto jeszcze zwrócić uwagę, że stanowi podstawowemu ψ_0 oscylatora odpowiada energia $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega \neq 0$. Energia stanu podstawowego nie może być równa zero. Gdyby tak było, oznaczałoby to, że wartości oczekiwane $\langle x^2 \rangle$ i $\langle p^2 \rangle$ są także równe zero. Zeru byłyby równe odpowiednie dyspersje, a to dawałoby $\sigma^2(x)\sigma^2(p) = 0$, co jest jawnie sprzeczne z zasadą nieoznaczoności, która stwierdza, że takie stany nie istnieją. Możemy więc powiedzieć, że fakt iż $E_0 \neq 0$ jest konsekwencją zasady nieoznaczoności. W *Uzupełnieniach* pokazujemy, że tak istotnie jest. Zasada nieoznaczoności wymaga, aby energie stanów własnych oscylatora spełniały warunek $\langle E \rangle \geq \frac{1}{2}\hbar\omega$. A więc minimalna energia (stan podstawowy $n = 0$) to właśnie $\frac{1}{2}\hbar\omega$.
