Jednowymiarowy oscylator harmoniczny

Punktem wyjścia do rozwiązania tego zagadnienia jest hamiltonian zagadnienia oscylatora harmonicznego postaci:

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{k\hat{x}^2}{2}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{k}{2}x^2$$

Równanie Schrödingera bez czasu ma postać:

$$\hat{H}\,\Phi(x)=E\,\Phi(x)$$

Wstawiając postać hamiltonianu do tego równania, otrzymuje się następujące równanie różniczkowe:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Phi(x)}{\partial x^2}+\frac{k}{2}x^2\,\Phi(x)=E\,\Phi(x)$$

Wprowadzając symbole

$$\xi=\alpha x\,,\ u(\xi)=\Phi\left(\frac{\xi}{\alpha}\right)$$

konsekwentnie:

$$\frac{\partial}{\partial x}=\alpha\frac{\partial}{\partial\xi}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2}=\alpha^2\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}$$

otrzymuje się następującą postać rozwiązywanego równania:

$$-\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m}\frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial\xi^2}+\frac{1}{2}\frac{k\xi^2}{\alpha^2}u(\xi)=E\,u(\xi)$$

$$-\frac{\partial^2 u(\xi)}{\partial\xi^2}+\frac{km}{\hbar^2\alpha^4}\xi^2\,u(\xi)=\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2}u(\xi)$$

Przyjmując

$$\frac{km}{\hbar^2\alpha^4}=1$$, skąd

$$\alpha=\sqrt[4]{\frac{km}{\hbar^2}}$$

oraz

$$\lambda=\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2}=\frac{2E}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{k}}$$

otrzymuje się

$$-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}u(\xi)+\xi^2 u(\xi)=\lambda u(\xi)$$
$$-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}u(\xi)+(\xi^2-\lambda)u(\xi)=0$$

Dla dużych wartości ξ (granica ξ dążącego do nieskończoności) równanie to zachowuje się jak równanie

$$-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}u(\xi)+\xi^2 u(\xi)=0$$

skąd $u(\xi)\approx e^{-\frac{\xi^2}{2}}$

Idąc tym tropem szuka się rozwiązań na funkcje własne operatora energii oscylatora harmonicznego postaci:

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

Pochodne tej funkcji mają postać:

$$\frac{d\,u(\xi)}{d\xi}=\frac{d\,H(\xi)}{d\xi}e^{-\frac{\xi^2}{2}}-\xi H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$
$$\frac{d^2\,u(\xi)}{d\xi^2}=\frac{d^2\,H(\xi)}{d\xi^2}e^{-\frac{\xi^2}{2}}-\xi\frac{d\,H(\xi)}{d\xi}e^{-\frac{\xi^2}{2}}-H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}-\xi\frac{d\,H(\xi)}{d\xi}e^{-\frac{\xi^2}{2}}+\xi^2 H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}=$$
$$=\frac{d^2\,H(\xi)}{d\xi^2}e^{-\frac{\xi^2}{2}}-2\,\xi\frac{d\,H(\xi)}{d\xi}e^{-\frac{\xi^2}{2}}+(\xi^2-1)H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Aby znaleźć funkcję H należy wstawić drugą pochodną i założoną postać funkcji *u* do pierwotnego równania różniczkowego:

$$-\frac{d^2\,H(\xi)}{d\xi^2}e^{-\frac{\xi^2}{2}}+2\,\xi\frac{d\,H(\xi)}{d\xi}e^{-\frac{\xi^2}{2}}-(\xi^2-1)H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}+(\xi^2-\lambda)H(\xi)e^{-\frac{\xi^2}{2}}=0$$
$$-\frac{d^2\,H(\xi)}{d\xi^2}+2\,\xi\frac{d\,H(\xi)}{d\xi}+(1-\lambda)H(\xi)=0$$
$$\frac{d^2\,H(\xi)}{d\xi^2}-2\,\xi\frac{d\,H(\xi)}{d\xi}+(\lambda-1)H(\xi)=0$$

Matematycznie można pokazać, że szukana funkcja *u* jest całkowalna z kwadratem tylko wtedy, gdy równanie powyższe przyjmuje postać:

$$\frac{d^2\,H(\xi)}{d\xi^2}-2\,\xi\frac{d\,H(\xi)}{d\xi}+2\,nH(\xi)=0,\ n\in\mathbb{N}$$

, czyli gdy $\lambda-1=2\,n$

Powyższe równanie różniczkowe nosi nazwę równanie Hermite'a. Rozwiązaniami tego równania są wielomiany Hermite'a określone następująco:

$$H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right)$$

Na podstawie wielomianów Hermite'a można utworzyć ortonormalną bazę w przestrzeni $L^2(R)$, tzw. funkcje Hermite'a o postaci:

$$\Psi_n(\xi)=\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}} H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Funkcje te odpowiadają postacią szukanym rozwiązaniom na funkcje własne operatora energii.

Warunkiem na to, aby rozwiązanie istniało, jest spełnienie warunku na wartość współczynnika λ, co równoważne jest ograniczeniem na dopuszczalne wartości energii E:

$$\begin{aligned}
\lambda-1 &=2n\\
\frac{2E}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{k}}-1 &=2n\\
\frac{2E}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{k}}&=2n+1\\
E&=\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{k}{m}}(2n+1)\\
E&=\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}\left(n+\frac{1}{2}\right)
\end{aligned}$$

Dopuszczalne wartości energii jednowymiarowego oscylatora harmonicznego określone są zależnością:

$$\boxed{\begin{array}{l} E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \quad , n=0, 1, 2, 3, \ldots \\ \text{gdzie} \\ \omega=\sqrt{\frac{k}{m}} \end{array}}$$

Funkcje własne odpowiadające tym wartościom własnym co do postaci są po prostu, zgodnie z wcześniejszymi rozważaniami, funkcjami Hermite'a. Po wyrugowaniu podstawień i znormalizowaniu ze względu na tę czynność otrzymuje się

$$\boxed{\Phi_n(x)=\sqrt[4]{\frac{km}{\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}} H_n\left(\sqrt[4]{\frac{km}{\hbar}}x\right) e^{-\sqrt{\frac{km}{\hbar}}\frac{x^2}{2}}=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}$$

Oscylator trójwymiarowy

Hamiltonian ma postać:

$$\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+\frac{k\hat{r}^2}{2}=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+\frac{k}{2}\left(x^2+y^2+z^2\right)$$

Zakładając postać funkcji własnej takiego operatora jako

$$\Psi(\vec{r})=f(x)g(y)h(z)$$

i wstawiając za funkcje *f*, *g*, *h* rozwiązania jednowymiarowe oscylatora harmonicznego, co uzasadnione jest z jednej strony postacią hamiltonianu (jest on "sumą" hamiltonianów oscylatora harmonicznego w poszczególnych trzech wymiarach), a z drugiej strony związkami komutacyjnymi pomiędzy operatorami składowych położenia i pędu, otrzymuje się następującą postać funkcji własnej hamiltonianu trójwymiarowego oscylatora harmonicznego:

$$\boxed{\begin{aligned}&\Phi_{\vec{n}}(\vec{r})=A_{\vec{n}}H_{n_x}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right)H_{n_y}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}y\right)H_{n_z}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}z\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}\vec{r}^2}\\&\text{gdzie}\\&\vec{n}=(n_x,n_y,n_z),\quad n_x,n_y,n_z=0,1,2,\ldots\\&A_{\vec{n}}=\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{\frac{3}{2}}\left(2^{n_x+n_y+n_z}n_x!n_y!n_z!\right)^{-\frac{1}{2}}\pi^{-\frac{3}{4}}\\&\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}\end{aligned}}$$

Wartości własne operatora energii trójwymiarowego oscylatora harmonicznego wynoszą:

$$\boxed{\begin{aligned}&E_{\vec{n}}=\hbar\omega\left(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2}\right)\quad,n_x,n_y,n_z=0,1,2,3,\ldots\\&\text{gdzie}\\&\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}\end{aligned}}$$

Warto zauważyć, że wartości własne oscylatora trójwymiarowego (wyjąwszy najniższy poziom energetyczny - podstawowy) są zdegenerowane, w przeciwieństwie do wartości własnych oscylatora jednowymiarowego.

Autor: Adam Drzewiecki <A.Drzewiecki@ztpnet.pl>