# ЛЕКЦИЯ 5

## КВАНТОВОМЕХАНИЧЕН ЛИНЕЕН ХАРМОНИЧЕН ОСЦИЛАТОР

Функцията на Хамилтон за линейния хармоничен осцилатор има вида

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} , \tag{6,1}$$

където $m$ е масата на осцилатора, а $\omega$ – кръговата честота на трептене. В класическата механика изразът за потенциалната енергия $U(x) = \frac{kx^2}{2}$ , където $k = m\omega^2$ е силовата константа, е верен само за малки отклонения от равновесното положение. За големи отклонения трябва да се отчетат поправките на ***анхармоничност*** : $U(x) = \frac{kx^2}{2} + \lambda x^3 + \mu x^4 + \cdots$ .

Законът за движение на линейния хармоничен осцилатор е $x = a\sin(\omega t + \varphi)$ , където $a$ е амплитудата, а $\varphi$ – началната фаза. Пълната му енергия е $E = \frac{m\omega^2 a^2}{2}$ .

При квантовомеханичното разглеждане, съгласно Постулат 2, равенството (6,1) преминава в равенство на оператори:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2. \tag{6,2}$$

Задачата е да намерим енергетичните нива и вълновите функции на квантово-механичния линеен хармоничен осцилатор. Отчитането на анхармоничните поправки в $U(x)$ е направено, например, в [9]. Както се вижда, $\hat{H}$ не зависи явно от времето. Следователно, трябва да решим уравнението на Шрьодингер за стационарните състояния

$$\hat{H}\,\Psi(x) = E\,\Psi(x) . \tag{6,3}$$

## 1. Решение с полиномите на Ермит

Заместваме (6,2) в (6,3) и получаваме

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\Psi(x) = E\,\Psi(x) . \tag{6,4}$$

Както е известно, в случая на стационарни състояния зависимостта на вълновата функция от времето е хармонична (вж. Лекция 3).

За опростяване на (6,4), въвеждаме безразмерна променлива $\xi = \dfrac{x}{x_o}$ ,

където $x_o = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}$ и безразмерен параметър

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} \cdot \tag{6,5}$$

Тогава

$$x = x_o\xi \ , \quad \frac{d\Psi}{dx} = \frac{d\Psi}{d\xi}\frac{d\xi}{dx} = \frac{1}{x_o}\frac{d\Psi}{d\xi} \ , \quad \frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{1}{x_o^2}\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} \cdot \tag{6,6}$$

Заместваме (6,6) в (6,4) и, отчитайки (6,5), получаваме безразмерното уравнение

$$\frac{d^2\Psi(\xi)}{d\xi^2} + \left(\lambda - \xi^2\right)\Psi(\xi) = 0 \ . \tag{6,7}$$

Функцията $\Psi(\xi)$ трябва да бъде еднозначна и крайна за всяко $\xi \in (-\infty, +\infty)$ , а при $\xi \to \pm\infty$ трябва да клони към нула. Уравнението (6,7) има две особени точки ($\pm\infty$).

Изследва се решението около особените точки и се търси решението на (6,7) като произведение на асимптотиките с ред по степените на $\xi$ . При $\xi \to \pm\infty$ , (6,7) приема вида

$$\Psi''(\xi) - \xi^2\Psi(\xi) = 0 . \tag{6,8}$$

Асимптотичните решения на последното уравнение са от типа $\Psi(\xi) = A\,\mathrm{e}^{\pm a\xi^2}$, където $A$ и $a$ са константи. Решението със знак "+" в експонентата се изключва, тъй като то расте неограничено при $\xi \to \pm\infty$. Относно $a$ трябва да кажем, че е необходимо $a > 0$ , понеже само в този случай $\Psi(\xi)$ клони към нула, при $\xi \to \pm\infty$. Следователно, търсим решението на (6,7) във вида:

$$\Psi(\xi) = \mathrm{e}^{-a\xi^2} \ f(\xi) \ , \tag{6,9}$$

където

$$f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \ . \tag{6,10}$$

Намираме производните $\Psi'(\xi)$ и $\Psi''(\xi)$ :

$$\Psi'(\xi) = \mathrm{e}^{-a\xi^2} \ f'(\xi) - 2a\xi\,\mathrm{e}^{-a\xi^2} \ f(\xi) \ ,$$
$$\Psi''(\xi) = \mathrm{e}^{-a\xi^2} \ f'' - 4a\xi\,\mathrm{e}^{-a\xi^2} \ f' + 4a^2\xi^2\,\mathrm{e}^{-a\xi^2} \ f - 2a\,\mathrm{e}^{-a\xi^2} \ f \ . \tag{6,11}$$

Заместваме (6,11) и (6,9) в (6,7) и, след съкращаване на $e^{-a\xi^2}$, получаваме

$$f'' - 4a\xi f' + (\lambda - \xi^2 - 2a + 4a^2\xi^2) f = 0 \ . \qquad (6,12)$$

Подбираме $a$ така, че коефициентът пред $\xi^2$ в (6,12) да е нула : $4a^2 - 1 = 0$, $4a^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad a = \dfrac{1}{2}$ , тъй като $a > 0$ . Тогава

$$\Psi(\xi) = e^{-\frac{\xi^2}{2}} f(\xi) \ . \qquad (6,13)$$

За функцията $f(\xi)$ получаваме деференциалното уравнение

$$f'' - 2\xi f' + (\lambda - 1) f = 0 \ . \qquad (6,14)$$

За да намерим реда (6,10) е необходимо да получим рекурентна формула за коефициентите му $a_k$ . От (6,10) определяме $f'(\xi)$ и $f''(\xi)$ :

$$f'(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} k a_k \xi^{k-1} \ , \qquad f''(\xi) = \sum_{k=2}^{\infty} k(k-1)\, a_k \xi^{k-2} \ .$$

Заместваме в (6,14). За да бъде един степенен ред от вида $\sum_k c_k \xi^k$ тъждествено равен на нула, необходимо е всички коефициенти $c_k$ да са нули. Приравнявайки на нула сумата от коефициентите пред еднаквите степени на $\xi$ , получваме следното рекурентно съотношение:

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

откъдето

$$a_{k+2} = \frac{2k + 1 - \lambda}{(k+2)(k+1)} a_k \ . \qquad (6,15)$$

Ако $a_o \neq 0$ и $a_1 = 0$ , можем да изразим всички коефициенти в реда чрез $a_o$ (или пък чрез $a_1$ , ако $a_o = 0$ и $a_1 \neq 0$ ). Функцията $f(\xi)$ , която се явява сума на степенния ред , очевидно е непрекъсната и еднозначна. Степенният ред трябва да бъде сходящ и такъв, че $\lim\limits_{\xi \to \pm\infty} \Psi(\xi) = 0$ . Редът е сходящ, тъй като при $k >> 1$ от (6,15) имаме $\dfrac{a_{k+2}}{a_k} \approx \dfrac{2}{k} \underset{k \to \infty}{\to} 0$ , което означава, обаче, че степенният ред има поведението на $\mathrm{e}^{\xi^2}$ . Проверка :

$$\mathrm{e}^{\xi^2} = 1 + \frac{\xi^2}{1!} + \frac{\xi^4}{2!} + \cdots + \frac{\xi^k}{\left(\frac{k}{2}\right)!} + \frac{\xi^{k+2}}{\left(\frac{k}{2} + 1\right)!} + \cdots \ ,$$

откъдето отношението на коефициентите пред $\xi^{k+2}$ и $\xi^{k}$ е $\frac{(k/2)!}{(1+k/2)!}=\frac{1}{1+k/2}\approx\frac{2}{k}$ , при $k>>1$ . Следователно, двата реда, със суми функциите $f(\xi)$ и $e^{\xi^2}$, са асимптотично равни. Тогава $\Psi(\xi)=e^{-\frac{\xi^2}{2}}e^{\xi^2}=e^{\frac{\xi^2}{2}}$. От тук се вижда, че $\lim\limits_{\xi\to\pm\infty}\Psi(\xi)=\infty$ , т.е. тази функция не може да бъде решение на разглежданата физична задача.

Тази трудност може да се избегне, ако предположим, че $f(\xi)$ е полином, т.е. $a_n\neq 0$ и $a_k=0$ за всяко $k>n$ . Тогава

$$0=a_{n+2}=\frac{2n+1-\lambda}{(n+1)(n+2)}a_n \ ,$$

откъдето следва, че

$$\lambda=2n+1\,,\quad n=0,1,2,\dots\,, \tag{6,16}$$

а $f(\xi)$ е полином от $n$-та степен $f(\xi)=f_n(\xi)$ с коефициенти, определяеми от рекурентното съотношение (6,15). Така

$$\Psi(\xi)=e^{-\frac{\xi^2}{2}}f_n(\xi) \text{ и } \lim_{\xi\to\pm\infty}\Psi(\xi)=0 \ .$$

От равенствата (6,5) и (6,16) следва, че енергията на квантовия линеен хармоничен осцилатор се квантува. Действително, $\frac{2E}{\hbar\omega}=2n+1$ , откъдето

$$E_n=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \ . \tag{6,17}$$

И така, от условието вълновата функция да е ограничена $\left(\Psi(\xi\to\pm\infty)=0\right)$ получаваме условието за квантуване на енергията. От (6,17) следва, че енергетичните нива се намират на еднакви разстояния едно от друго и минималната енергия (енергията на основното състояние) е $E_o=\frac{\hbar\omega}{2}$ – ***енергия на нулевите колебания***.

Замествайки (6,16) в (6,14), получаваме диференциалното уравнение за полиномите на Ермит $H_n(\xi)$ (вж. Приложение 2) :

$$f_n''(\xi)-2\xi\, f_n'(\xi)+2n\, f_n(\xi)=0.$$

Следователно

$$f_n(\xi)\equiv H_n(\xi) \ .$$

Вълновата функция на $n$-тото възбудено състояние може да се представи във вида

$$\Psi_n(\xi) = A_n \, \mathrm{e}^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \ , \qquad (6,18)$$

където $A_n$ се определя от условието за нормировка:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\,\Psi_n(x)\,|^2 \, dx = A_n^2 x_o \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\xi^2} \, H_n^2(\xi)\, d\xi = 1 \ . \qquad (6,19)$$

Като вземем предвид ортонормираността на полиномите на Ермит [7,15]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\xi^2} \, H_m(\xi) H_n(\xi)\, d\xi = 2^n n! \sqrt{\pi}\, \delta_{mn} \ ,$$

за $A_n$ получаваме

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! x_o \sqrt{\pi}}} = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \ . \qquad (6,20)$$

От (6,17) и (6,18) се вижда, че енергетичният спектър е дискретен и неизроден. Както отбелязахме в Лекция 5, за всички едномерни задачи в квантовата механика дискретният спектър е неизроден.

Вълновите функции на осцилатора (6,18) се явяват четни при четно $n$ и нечетни – при нечетно $n$, понеже полиномите на Ермит имат това свойство (вж. Приложение 2). Всяко състояние на линейния хармоничен осцилатор е с определена четност : $\Psi_o, \Psi_2, \Psi_4, \cdots$ – четни, а $\Psi_1, \Psi_3, \Psi_5, \cdots$ – нечетни. От (6,2) се вижда, че $\hat{H}(x) = \hat{H}(-x)$ . Следователно, $\hat{P}\,\hat{H}(x)\Psi(x) = \hat{H}(-x)\Psi(-x) = $ $= \hat{H}(x)\hat{P}\Psi(x)$ , където $\hat{P}$ е оператора на пространственото отражение (вж. Лекция 3), откъдето следва, че $\hat{P}\,\hat{H} = \hat{H}\,\hat{P}$ , т.е. $\left[\hat{P}, \hat{H}\right] = 0$ и $\hat{P}$ описва интеграл на движението, при което $\hat{P}$ и $\hat{H}$ имат общи собствени функции. Както видяхме в Лекция 3, $\hat{P} = \pm \hat{I}$ ($\hat{I}$ е единичния оператор, $\hat{I}\,\Psi = \Psi$). Когато $\hat{P} = \hat{I}$, $\hat{P}\,\Psi(x) = \Psi(x)$ , функциите $\Psi(x)$ са четни, а когато $\hat{P} = -\hat{I}$ , $\hat{P}\,\Psi(x) = -\Psi(x)$ , т.е. $\Psi(x)$ са нечетни функции. Следователно, собствените функции на $\hat{H}$ са четни или нечетни.

Точките, в които вълновата функция е равна на нула, се наричат ***възли на вълновата функция***. Броят им е равен на квантовото число $n$ $(n = 0, 1, 2 \ldots)$ .

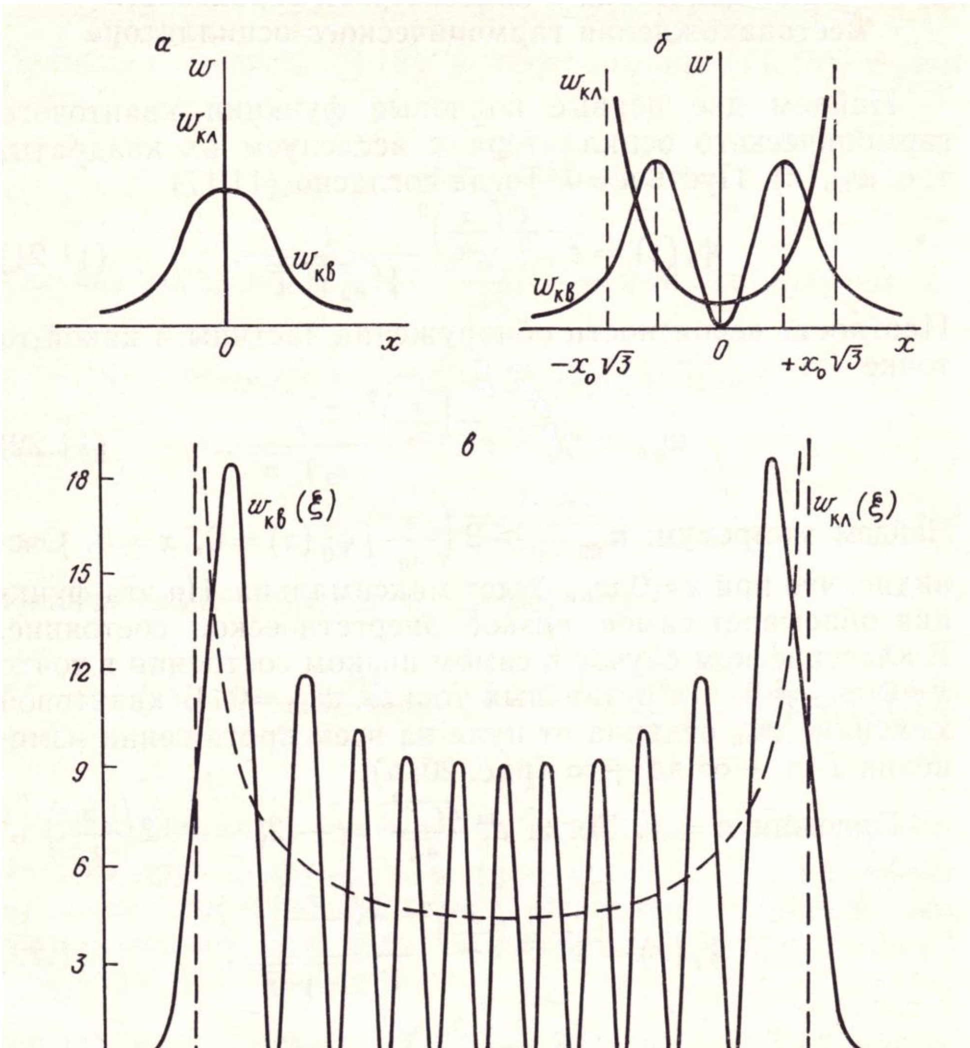
Нека определим, при $n = 0$ и $n = 1$ , плътността на вероятността за намиране на осцилатора в някаква точка $x$ , т.е. $w_{\text{кв}}(x) = |\,\Psi_n(x)\,|^2$. При $n = 0$ , съгласно (6,18), вземайки предвид (6,20) и $H_o(\xi) = 1$ , имаме

$$\Psi_o(x) = \frac{1}{\sqrt{x_o\sqrt{\pi}}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_o}\right)^2}\,. \qquad (6,21)$$

Търсената плътност на вероятността в случая ще бъде

$$w_{\text{кв}}(x) = \Psi_o^2(x) = \frac{1}{x_o\sqrt{\pi}}\,\mathrm{e}^{-\left(\frac{x}{x_o}\right)^2}\,. \qquad (6,22)$$

Намираме екстремума: $w'_{\text{кв}} = -2\dfrac{x}{x_o}\Psi_o^2(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad x = 0$. Очевидно, при $x = 0$ $w_{\text{кв}}$ ще бъде максимална. Трябва да отбележим, че $w_{\text{кв}} \neq 0$ за всяко $x \in (-\infty, +\infty)$. В класическата механика енергията на основното състояние (състояние на покой) е равна на нула и в точката $x = 0$ – $w_{\text{кл}} \neq 0$, а в останалите точки $w_{\text{кл}} = 0$ (фиг. 6,1а).




фиг. 6.1

Нека $n=1$ . Отчитайки (6,20) и $H_1(\xi)=2\xi$ , съгласно (6,18), имаме

$$\Psi_1(x)=\frac{2\left(\frac{x}{x_o}\right)}{\sqrt{2x_o\sqrt{\pi}}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{x_o}\right)^2}, \tag{6,23}$$

$$E_1=\frac{3\hbar\omega}{2}\cdot \tag{6,24}$$

Търсената плътност на вероятността сега ще бъде

$$w_{\text{кв}}(x)=\Psi_1^2(x)=\frac{2}{x_o\sqrt{\pi}}\,\mathrm{e}^{-\left(\frac{x}{x_o}\right)^2}\left(\frac{x}{x_o}\right)^2. \tag{6,25}$$

Полагаме $w'_{\text{кв}}=0$:

$$w'_{\text{кв}}(\xi)=C\left(\xi^2\,\mathrm{e}^{-\xi^2}\right)'=2C\left(1-\xi^2\right)\xi\,\mathrm{e}^{-\xi^2}=0.$$

Екстремумите са в точките $\xi_1=0\ (x=0)$ и $\xi_{2,3}=\pm1\ (x=\pm x_o)$. В точката $x=0$ функцията (6,25) има минимум, а в точките $x=\pm x_o$ – максимуми.

Ще сравним $w_{\text{кв}}(x)$ в състояние $n=1$ с $w_{\text{кл}}(x)$ предполагайки, че класическият осцилатор притежава същата енергия както квантовия. От равенството на енергиите $\frac{m\omega^2a^2}{2}=\frac{3\hbar\omega}{2}$ определяме амплитудата

$$a=\sqrt{\frac{3\hbar}{m\omega}}=\sqrt{3}\,x_o\ . \tag{6,26}$$

Вероятността $w_{\text{кл}}(x)\,dx$ класическият осцилатор да се намира в интервала $(x,\,x+dx)$ е пропорционална на времето $dt$ за пребиваване в този интервал, т.е.

$$w_{\text{кл}}(x)\,dx=\frac{dt}{T}\ , \tag{6,27}$$

където $T=\frac{2\pi}{\omega}$ е периода на трептене , а $dt=\frac{dx}{v}$ ($v$ е скоростта на частицата). От формулата

$$x=a\sin(\omega t+\varphi) \tag{6,28}$$

получаваме

$$v=\frac{dx}{dt}=a\omega\cos(\omega t+\varphi). \tag{6,29}$$

Като изключим времето $t$ от (6,28) и (6,29), намираме

$$v = a\omega\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}\,. \qquad (6,30)$$

Така,

$$w_{\text{кл}}(x)\,dx = \frac{1}{2\pi a}\frac{dx}{\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}}\,, \quad -a < x < a\,, \qquad (6,31)$$

или, с отчитане на (6,26),

$$w_{\text{кл}}(x)\,dx = \frac{1}{2\sqrt{3}\pi x_o}\frac{dx}{\sqrt{1-\frac{1}{3}\frac{x^2}{x_o^2}}}\,, \quad -\sqrt{3}\,x_o < x < \sqrt{3}\,x_o\,. \qquad (6,32)$$

Тази вероятност се оказва най-голяма в околностите на точките на обръщане $x = \pm a = \pm\sqrt{3}\,x_o$ , в които скоростта става равна на нула. В околност на точката $x = 0$ частицата има най-голяма скорост (вж. (6,30)) и вероятността да бъде намерена в тази точка е минимална. Така се вижда огромното различие в поведението на квантовия и класическия осцилатор (вж. фиг. 6,1б) . При големи квантови числа $n$ (фиг. 6,1в) квантовото разпределение на вероятността се приближава до класическото.