8 Proste układy dynamiczne

8.1 Nieskończona studnia potencjału

Rozpatrzmy teraz potencjał

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -L/2 \text{ oraz } L/2 < x \\ & \\ 0 & -L/2 < x < L/2 \end{cases} . \tag{8.1}$$

Wiemy, że wewnątrz studni ogólne rozwiązanie równania Schrödingera jest superpozycją fal płaskich

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = A' \sin(kx) + B' \cos(kx). \tag{8.2}$$

Dodatkowo zauważmu, że hamiltonian

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{8.3}$$

jest niezmienniczy ze względu na transformację odbicia:

$$x \to -x \tag{8.4}$$

Co oznacza, że

$$u(x) \to u(-x) = \varepsilon u(x). \tag{8.5}$$

Dwukrotne zastosowanie tej transformacji daje

$$u(x) = \varepsilon^2 u(x) \Longrightarrow \varepsilon = \pm 1. \tag{8.6}$$

Zatem funkcje własne hamiltonianu symetrycznego ze wzgędu na odbicia są albo symetryczne, albo antysymetryczne:

$$\begin{aligned} u_s(x) &= B\cos(kx), \\ u_a(x) &= A\sin(kx). \end{aligned} \tag{8.7}$$

Nieskończoność potencjału na brzegach implikuje warunki brzegowe:

$$u(-L/2) = u(L/2) = 0. \tag{8.8}$$

Tylko jeden z tych warunków jest niezależny. Mamy zatem dwa typy rozwiązań:

$$\begin{aligned} \cos(kL/2) &= 0 \Longrightarrow k = \frac{\pi}{L}(1+2n_s) = \frac{\pi}{L}n'_s \text{ gdzie } n_s = 1,3,5\ldots \\ \sin(kL/2) &= 0 \Longrightarrow k = \frac{\pi}{L}2(1+n_a) = \frac{\pi}{L}n'_a \text{ gdzie } n'_a = 2,4,6\ldots \end{aligned} \tag{8.9}$$

Zatem ogólnie

$$k = \frac{\pi}{L}n \quad n = 1,2,3\ldots$$

i energia wynosi

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}n^2. \tag{8.10}$$

Poziomy energetyczne są skwantowane. Kwantyzacja bierze się z warunków brzegowych.

9 Oscylator harmoniczny: rozwiązanie równania Schrödingera przez rozwijanie w szereg

Klasycznie oscylator harmoniczny to układ, w którym siła działająca na punkt materialny proporcjonalna jest do wychylenia: $F = -k\,x$ (np. ciężarek na sprężynie). Sile takiej odpowiada potencjał kwadratowy w x: $V(x) = kx^2/2$. Zauważmy, że rozwijając dowolny potencjał posiadający minimum w punkcie x_0 otrzymujemy szereg

$$V(x) = V(x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots\,, \tag{9.11}$$

w którym znika wyraz liniowy w $(x - x_0)$. Stąd potencjał kwadratowy jest dobrym przybliżeniem dla ruchu z małą energią dla praktycznie wszystkich potencjałów posiadających minimum.

Operator hamiltona opisujący ruch w takim potencjale dany jest wzorem:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{\hat{p}^2}{m} + \omega^2 m\,x^2\right), \tag{9.12}$$

gdzie $\omega = \sqrt{k/m}$ jest klasyczną częstością kołową drgań oscylatora. Niezależne od czasu równanie Schrödingera przyjmuje następującą postać

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi. \tag{9.13}$$

Przepiszmy równanie (9.13) mnożąc je stronami przez $2/\hbar\omega$:

$$-\frac{\hbar}{m\omega}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar}x^2\psi = \frac{2E}{\hbar\omega}\psi. \tag{9.14}$$

Aby rozwiązać równanie (9.14) warto wprowadzić bezwymiarową zmienną ξ i stałą λ związaną z energią E:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x,\ \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{9.15}$$

W tych zmiennych równanie (9.14) przyjmuje wyjątkowo prostą postać:

$$\psi'' + (\lambda - \xi^2)\psi = 0. \tag{9.16}$$

Spróbujmy najpierw oszacować jak funkcja $\psi(\xi)$ zachowuje się w granicy $\xi \to \pm\infty$. W granicy tej równanie (9.16)

$$\psi'' - \xi^2\psi = 0, \tag{9.17}$$

daje się łatwo rozwiązać:

$$\psi(\xi) = H\,e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}. \tag{9.18}$$

Rzeczywiście

$$\psi'(\xi) = \pm\xi H e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2},\ \psi''(\xi) = \pm H e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2} + \xi^2 H e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}. \tag{9.19}$$

Człon bez ξ^2 w drugiej pochodnej musimy zaniedbać, gdyż patrzymy się tylko na człony wiodące w granicy $\xi \to \pm\infty$. Jest też jasne, że musimy odrzucić rozwiązanie ze znakiem $+$ w eksponencie, gdyż funkcja ψ musi znikać w $\pm\infty$.

Następny krok polega na uzmiennieniu stałej H:

$$\psi(\xi) = H(\xi)\, e^{-\frac{1}{2}\xi^2}. \tag{9.20}$$

Podstawiając (9.20) do (9.16) otrzymujemy równanie różniczkowe na $H(\xi)$:

$$H'' - 2\xi H' + (\lambda - 1)H = 0, \tag{9.21}$$

gdzie primowanie oznacza różniczkowanie po ξ. Będziemy szukać rozwiązania równania (9.21) rozwijając $H(\xi)$ wokół $\xi = 0$. Ponieważ $\xi = 0$ jest regularnym punktem równania (9.21) szereg na $H(\xi)$ i pochodne przyjmuje postać

$$\begin{aligned} H &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n, \\ H' &= \sum_{n=0}^{\infty} n a_n \xi^{n-1}, \\ H'' &= \sum_{n=0}^{\infty} n(n-1) a_n \xi^{n-2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} \xi^n. \end{aligned} \tag{9.22}$$

Podstawiając (9.22) do (9.21) otrzymujemy

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left\{ (n+2)(n+1)a_{n+2} - 2na_n + (\lambda - 1)a_n \right\} \xi^n = 0. \tag{9.23}$$

Przyrównanie do zera współczynników przy ξ^n daje nam relację rekurencyjną między stałymi a_n:

$$a_{n+2} = \frac{1 + 2n - \lambda}{(n+2)(n+1)} a_n. \tag{9.24}$$

Zauważmy po pierwsze, że relacja (9.24) łączy współczynniki o n różniącym się o 2. Zatem funkcja $H(\xi)$ jest albo parzysta (symetryczna) albo nieparzysta (antysymetryczna). Współczynniki a_0 i a_1 są na tym etapie dowolne i zostaną wyznaczone z warunku unormowania funkcji falowej ψ. Po drugie, zbadajmy zachowanie się rozwiązań (9.22) dla dużych n:

$$\begin{aligned} H_{\text{parz.}}(\xi) &= \sum_{m=0}^{\infty} b_m\, \xi^{2m}, \text{ gdzie } b_{m+1} = \frac{1 + 4m - \lambda}{(2m+2)(2m+1)} b_m, \\ H_{\text{nparz.}}(\xi) &= \xi \sum_{m=0}^{\infty} c_m\, \xi^{2m}, \text{ gdzie } c_{m+1} = \frac{3 + 4m - \lambda}{(2m+3)(2m+2)} c_m. \end{aligned} \tag{9.25}$$

Dla dużych m relacje rekurencyjne (9.25) redukują się do

$$b_{n+1} = \frac{1}{n} a_n, \ c_{n+1} = \frac{1}{n} c_n \tag{9.26}$$

co daje asymptotykę

$$H(\xi) \to e^{\xi^2} \text{ dla } \ \xi \to \pm\infty.$$

Takie zachowanie w połączeniu ze wzorem (9.20) powodowałoby rozbieżność $\psi(\xi)$ dla dużych ξ. Dlatego, aby tego uniknąć musimy szereg (9.22) urwać dla pewnego n. Wówczas $H(\xi)$ będą wielomianami stopnia n. Warunek urwania szeregu ma postać

$$\lambda = 1 + 2n, \tag{9.27}$$

co tłumaczy się na skwantowane wartości energii

$$E_n = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + n \right). \tag{9.28}$$

Warunki kwantowania energii otrzymaliśmy tutaj, podobnie jak w przypadku studni potencjału, z narzucenia odpowiednich warunków brzegowych w nieskończoności. Poziomy energetyczne są od siebie równoodległe. Takie właśnie założenie robi się wyprowadzając wzór Plancka na gęstość energii promieniowania ciała doskonale czarnego.

9.1 Stan podstawowy - energia drgań zerowych

Warto zwrócić uwagę, że w przeciwieństwie do mechaniki klasycznej, stan podstawowy ma energię różną od zera $E_0 = \hbar\omega/2$. Mówi się w tym kontekście o energii *drgań zerowych*. Energia drgań zerowych jest efektem czysto kwantowym (jest proporcjonalna do $\hbar$). Funkcja falowa stanu podstawowego dana jest tylko przez czynnik exponencjalny (9.20), ponieważ dla $n = 0$ $H_0 = const$. Unormowana funkcja falowa ma postać funkcji Gaussa:

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right). \tag{9.29}$$

Widzimy, że w stanie podstawowym

$$\langle \hat{x} \rangle_0 = 0, \quad \langle \hat{p} \rangle_0 = 0 \tag{9.30}$$

gdyż odpowiednie całki znikają (są to całki z kwadratu (9.29) pomnożonego przez x, które jest funkcją nieparzystą). Stąd średnie odchylenia kwadratowe, zarówno dla $\hat{x}$ jak i dla $\hat{p}$, redukują się do średnich kwadratów tych operatorów:

$$\begin{aligned} \Delta x^2 \overset{\text{ozn}}{=} \left\langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle_0)^2 \right\rangle_0 &= \left\langle \hat{x}^2 \right\rangle_0, \\ \Delta p^2 \overset{\text{ozn}}{=} \left\langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle_0)^2 \right\rangle_0 &= \left\langle \hat{p}^2 \right\rangle_0. \end{aligned} \tag{9.31}$$

Wielkości Δx^2 i Δp^2 można wyliczyć znając funkcję falową stanu podstawowego (9.29):

$$\Delta p^2 = \frac{1}{2}m\omega\hbar, \ \Delta x^2 = \frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega} \tag{9.32}$$

i stąd energia

$$E_0 = \left\langle \hat{H} \right\rangle_0 = \frac{1}{2}\left(\frac{\Delta p^2}{m} + m\omega^2\,\Delta x^2\right) = \frac{1}{2}\hbar\omega. \tag{9.33}$$

Wielkości Δp i Δx nazywamy *nieoznaczonościami* pędu i położenia (w stanie podstawowym). Zgodnie z interpretacją probabilistyczną funkcji falowej, średnie wielkości z operatorów odpowiadających wartościom fizycznym są równe średnim wynikom pomiarów tych wielkości, przeprowadzonych na układzie będącym w danym stanie kwantowym (tu w stanie podstawowym). A zatem średnie odchylenia kwadratowe pędu i położenia nie mogą być arbitralnie małe, gdyż spełniony jest związek

$$\Delta x\,\Delta p = \frac{\hbar}{2}. \tag{9.34}$$

Związek (9.34) nazywa się *zasadą nieoznaczoności* Heisenberga. Mówi ona, że dokładności pomiarów pędu i położenia są ze sobą związane: nie jest możliwe równoczesne zmierzenie tych wielkości lepiej niż na to pozwala związek (9.34). Możnaby przypuszczać, że jest to nie tyle własność mechaniki kwantowej, co własność funkcji falowej stanu podstawowego oscylatora harmonicznego. Ogólne wyprowadzenie zasady nieoznaczoności przekona nas wkrótce, że w ogólności

$$\Delta x\,\Delta p \geqslant \frac{\hbar}{2}, \tag{9.35}$$

a więc funkcja (9.34) minimalizuje zasadę nieoznaczoności. Z drugiej strony zauważmy, że ze względu na niezmiernie małą wartość numeryczną stałej Plancka, związki (9.34) czy (9.35) są istotne tylko w mikroświecie.

Dodajmy na koniec, że funkcja falowa, a więc i prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w przestrzeni rozciągają się poza klasycznie dozwolony obszar zmiennej x.

9.2 Wielomiany Hermite'a

Podstawiając do równania (9.21) warunek kwantyzacji na λ (9.27) otrzymujemy *równanie Hermite'a*

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0, \tag{9.36}$$

którego rozwiązaniami są *wielomiany Hermite'a.* Zamiast posługiwać się bezpośrednio równaniem (9.36) i związkami rekurencyjnymi (9.24), aby znaleźć jawną postać wielomianów H_n warto posłużyć się tzw. *funkcją tworzącą* $F(\xi, u)$:

$$F(\xi, u) = \exp\left(-u^2 + 2\xi u\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u^n}{n!} H_n(\xi). \tag{9.37}$$

Najpierw sprawdźmy, że tak zdefiniowane H_n spełniają równanie (9.36). W tym celu zróżniczkujmy $F(\xi, u)$ po ξ

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(\xi,u)}{\partial \xi} &= 2u \exp\left(-u^2 + 2\xi u\right) = 2\sum_{n=0}^{\infty} n\frac{u^n}{n!} H_{n-1}(\xi), \\ \frac{\partial F(\xi,u)}{\partial \xi} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u^n}{n!} H_n'(\xi) \end{aligned} \tag{9.38}$$

i po u :

$$\begin{aligned} \frac{\partial F(\xi,u)}{\partial u} &= 2(\xi - u) \exp\left(-u^2 + 2\xi u\right) = 2\sum_{n=0}^{\infty} \frac{u^n}{n!} \left(\xi H_n(\xi) - nH_{n-1}(\xi)\right), \\ \frac{\partial F(\xi,u)}{\partial u} &= \sum_{n=0}^{\infty} n\frac{u^{n-1}}{n!} H_n(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u^n}{n!} H_{n+1}(\xi). \end{aligned} \tag{9.39}$$

Porównując współczynniki przy jednakowych potęgach u otrzymujemy użyteczne związki

$$\begin{aligned} H_n' &= 2nH_{n-1}, \\ H_{n+1} &= 2\xi H_n - 2nH_{n-1}. \end{aligned} \tag{9.40}$$

Z równań tych można wyprowadzić równanie Hermite'a. Po pierwsze podstawmy pierwsze z nich do drugiego

$$H_{n+1} - 2\xi H_n + H_n' = 0.$$

Następnie zróżniczkujmy po ξ:

$$H_{n+1}' - 2H_n - 2\xi H_n' + H_n'' = 0$$

i zastosujmy pierwsze z równań (9.40) ale dla H_{n+1}':

$$2(n+1)H_n - 2H_n - 2\xi H_n' + H_n'' = 0.$$

W ten sposób otrzymaliśmy (9.36).

Wiele własności wielomianów Hermite'a daje się udowodnić przy pomocy funkcji tworzącej. Jawną postać H_n można znaleźć różniczkując n-krotnie po u funkcję tworzącą (9.37):

$$H_n(\xi) = \left.\frac{\partial^n F(\xi,u)}{\partial u^n}\right|_{u=0}. \tag{9.41}$$

Z drugiej strony, ponieważ

$$F(\xi,u) = e^{\xi^2} e^{-(u-\xi)^2},$$

$$\frac{\partial^n F(\xi,u)}{\partial u^n} = (-)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-(u-\xi)^2}.$$

A zatem

$$H_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2}. \tag{9.42}$$

Warto wypisać kilka pierwszych wielomianów Hermite'a:

$$H_0(\xi) = 1, \; H_1(\xi) = 2\xi, \; H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2. \tag{9.43}$$

Przy pomocy funkcji tworzącej można też łatwo wyliczyć normę funkcji falowych oscylatora harmonicznego. W tym celu policzmy całkę

$$\begin{aligned} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, F(\xi, u) \, F(\xi, w) e^{-\xi^2} &= e^{2uw} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, \exp\left\{ -\xi^2 + 2\,(u+w)\,\xi - (u+w)^2 \right\} \\ &= e^{2uw} \sqrt{\pi}, \end{aligned} \tag{9.44}$$

gdzie gaussowską całkę po $d\xi$ wykonaliśmy zmieniając zmienne $\xi' = \xi - (u + w)$. Rozwijając obie strony (9.44) w szereg w u i w otrzymujemy

$$\sum_{\substack{m=0 \\ n=0}}^{\infty} \frac{u^m w^n}{n! \, m!} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, H_m(\xi) \, H_n(\xi) \, e^{-\xi^2} = \sqrt{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2uw)^n}{n!},$$

z czego wynika

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\xi \, H_m(\xi) \, H_n(\xi) \, e^{-\xi^2} = \sqrt{\pi} 2^n n! \, \delta_{nm} \, . \tag{9.45}$$

A zatem unormowana funkcja falowa oscylatora harmonicznego ma postać:

$$\psi_n(x) = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{2^n n!} \right)^{1/2} H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right). \tag{9.46}$$