

## 7 Proste układy dynamiczne

### 7.1 Nieskończona studnia potencjału

Rozpatrzmy teraz potencjał

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < -L/2 \text{ oraz } L/2 < x \\ 0 & -L/2 < x < L/2 \end{cases}. \quad (7.1)$$

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

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} = A' \sin(kx) + B' \cos(kx). \quad (7.2)$$

Dodatkowo zauważmy, że hamiltonian

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \quad (7.3)$$

jest niezmienniczy ze względu na transformację odbicia:

$$x \rightarrow -x \quad (7.4)$$

Co oznacza, że

$$u(x) \rightarrow u(-x) = \varepsilon u(x). \quad (7.5)$$

Dwukrotne zastosowanie tej transformacji daje

$$u(x) = \varepsilon^2 u(x) \implies \varepsilon = \pm 1. \quad (7.6)$$

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

$$\begin{aligned} u_s(x) &= B \cos(kx), \\ u_a(x) &= A \sin(kx). \end{aligned} \quad (7.7)$$

Nieskończoność potencjału na brzegach implikuje warunki brzegowe:

$$u(-L/2) = u(L/2) = 0. \quad (7.8)$$

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

$$\begin{aligned} \cos(kL/2) = 0 &\implies k = \frac{\pi}{L}(1 + 2n_s) = \frac{\pi}{L}n'_s \text{ gdzie } n'_s = 1, 3, 5 \dots \\ \sin(kL/2) = 0 &\implies k = \frac{\pi}{L}2(1 + n_a) = \frac{\pi}{L}n'_a \text{ gdzie } n'_a = 2, 4, 6 \dots \end{aligned} \quad (7.9)$$

Zatem ogólnie

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

i energia wynosi

$$E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2. \quad (7.10)$$

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

## 7.2 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:  $F = -kx$  (np. ciężarek na sprężynie). Siłę takiej odpowiada potencjał kwadratowy w  $x$ :  $V(x) = kx^2/2$ . Zauważmy, że rozwijając dowolny potencjał posiadający minimum w punkcie  $x_0$  otrzymujemy szereg

$$V(x) = V(x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 + \dots, \quad (7.11)$$

w którym zanika 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:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2} \left( \frac{\hat{p}^2}{m} + \omega^2 m x^2 \right), \quad (7.12)$$

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi. \quad (7.13)$$

Przepiszmy równanie (7.13) mnożąc je stronami przez  $2/\hbar\omega$ :

$$-\frac{\hbar}{m\omega} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \psi = \frac{2E}{\hbar\omega} \psi. \quad (7.14)$$

Aby rozwiązać równanie (7.14) warto wprowadzić bezwymiarową zmienną  $\xi$  i stałą  $\lambda$  związaną z energią  $E$ :

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}. \quad (7.15)$$

W tych zmiennych równanie (7.14) przyjmuje wyjątkowo prostą postać:

$$\psi'' + (\lambda - \xi^2)\psi = 0. \quad (7.16)$$

Spróbujmy najpierw oszacować jak funkcja  $\psi(\xi)$  zachowuje się w granicy  $\xi \rightarrow \pm\infty$ . W granicy tej równanie (7.16)

$$\psi'' - \xi^2\psi = 0, \quad (7.17)$$

daje się łatwo rozwiązać:

$$\psi(\xi) = H e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}. \quad (7.18)$$

Rzeczywiście

$$\psi'(\xi) = \pm\xi H e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}, \quad \psi''(\xi) = \pm H e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2} + \xi^2 H e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}. \quad (7.19)$$

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

Następny krok polega na uzmiennieniu stałej  $H$ :

$$\psi(\xi) = H(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}. \quad (7.20)$$

Podstawiając (7.20) do (7.16) otrzymujemy równanie różniczkowe na  $H(\xi)$ :

$$H'' - 2\xi H' + (\lambda - 1)H = 0, \quad (7.21)$$

gdzie primowanie oznacza różniczkowanie po  $\xi$ . Będziemy szukać rozwiązania równania (7.21) rozwijając  $H(\xi)$  wokół  $\xi = 0$ . Ponieważ  $\xi = 0$  jest regularnym punktem równania (7.21) szereg na  $H(\xi)$  i pochodne przyjmuje postać

$$\begin{aligned} H &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \xi^n, \\ H' &= \sum_{n=0}^{\infty} n a_n \xi^{n-1}, \\ H'' &= \sum_{n=0}^{\infty} n(n-1) a_n \xi^{n-2} = \sum_{n=0}^{\infty} (n+2)(n+1) a_{n+2} \xi^n. \end{aligned} \quad (7.22)$$

Podstawiając (7.22) do (7.21) otrzymujemy

$$\sum_{n=0}^{\infty} \{(n+2)(n+1)a_{n+2} - 2na_n + (\lambda-1)a_n\} \xi^n = 0. \quad (7.23)$$

Przyrównanie do zera współczynników przy  $\xi^n$  daje nam relację rekurencyjną między stałymi  $a_n$ :

$$a_{n+2} = \frac{1+2n-\lambda}{(n+2)(n+1)} a_n. \quad (7.24)$$

Zauważmy po pierwsze, że relacja (7.24) 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  $\psi$ . Po drugie, zbadajmy zachowanie się rozwiązań (7.22) dla dużych  $n$ . W tym celu warto rozważyć osobno rozwiązania parzyste i nieparzyste definiując:

$$b_m = a_{2m}, \quad c_m = a_{2m+1}. \quad (7.25)$$

Wówczas

$$\begin{aligned} H_{\text{parz.}}(\xi) &= \sum_{m=0}^{\infty} b_m \xi^{2m}, \text{ gdzie } b_{m+1} = \frac{1+4m-\lambda}{(2m+2)(2m+1)} b_m, \\ H_{\text{nieparz.}}(\xi) &= \xi \sum_{m=0}^{\infty} c_m \xi^{2m}, \text{ gdzie } c_{m+1} = \frac{3+4m-\lambda}{(2m+3)(2m+2)} c_m. \end{aligned} \quad (7.26)$$

Dla dużych  $m$  relacje rekurencyjne (7.26) redukują się do

$$b_{m+1} = \frac{1}{m}b_m, \quad c_{m+1} = \frac{1}{m}c_m \quad (7.27)$$

co daje asymptotykę

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

Takie zachowanie w połączeniu ze wzorem (7.20) powodowałoby rozbieżność  $\psi(\xi)$  dla dużych  $\xi$ . Dlatego, aby tego uniknąć musimy szereg (7.22) urwać dla pewnego  $n$ . Wówczas  $H(\xi)$  będą wielomianami stopnia  $n$ . Warunek urwania szeregu (dla  $n$  parzystych i nieparzystych) ma postać

$$\lambda = 1 + 2n, \quad (7.28)$$

co tłumaczy się na skwantowane wartości energii

$$E_n = \hbar\omega \left( \frac{1}{2} + n \right). \quad (7.29)$$

Warunki kwantowania energii otrzymaliśmy tutaj, podobnie jak w przypadku studni potencjału, z narzucenia odpowiednich warunków brzegowych w nieskończoności. Poziomy energetyczne są od siebie równoodległe.

### 7.3 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 exponentialny (7.20), ponieważ dla  $n = 0$   $H_0 = \text{const}$ . Unormowana funkcja falowa ma zatem postać funkcji Gaussa:

$$\psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right). \quad (7.30)$$

Widzimy, że w stanie podstawowym

$$\langle \hat{x} \rangle_0 = 0, \quad \langle \hat{p} \rangle_0 = 0 \quad (7.31)$$

gdyż odpowiednie całki znikają (są to całki z kwadratu (7.30) 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:

$$\begin{aligned} \Delta x^2 &\stackrel{\text{ozn}}{=} \langle (\hat{x} - \langle \hat{x} \rangle_0)^2 \rangle_0 = \langle \hat{x}^2 \rangle_0, \\ \Delta p^2 &\stackrel{\text{ozn}}{=} \langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle_0)^2 \rangle_0 = \langle \hat{p}^2 \rangle_0. \end{aligned} \quad (7.32)$$

Wielkości  $\Delta x^2$  i  $\Delta p^2$  można wyliczyć znając funkcję falową stanu podstawowego (7.30):

$$\Delta p^2 = \frac{1}{2}m\omega\hbar, \quad \Delta x^2 = \frac{1}{2}\frac{\hbar}{m\omega} \quad (7.33)$$

i stąd energia

$$E_0 = \langle \hat{H} \rangle_0 = \frac{1}{2} \left( \frac{\Delta p^2}{m} + m\omega^2 \Delta x^2 \right) = \frac{1}{2} \hbar\omega. \quad (7.34)$$

Wielkości  $\Delta p$  i  $\Delta x$  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

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \quad (7.35)$$

Związek (7.35) 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 (7.35). Można by przypuszczać, że jest to nie tyle własność mechaniki kwantowej, co własność funkcji falowej stanu podstawowego oscylatora harmonicznego. Ogólne wyprowadzenie zasady nieoznaczoności przekonało nas jednak, że w ogólności

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (7.36)$$

a więc funkcja (7.35) minimalizuje zasadę nieoznaczoności. Z drugiej strony zauważmy, że ze względu na niezmiernie małą wartość numeryczną stałej Plancka, związki (7.35) czy (7.36) 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  $x$ .

## 7.4 Wielomiany Hermite'a

Podstawiając do równania (7.21) warunek kwantyzacji na  $\lambda$  (7.28) otrzymujemy *równanie Hermite'a*

$$H_n'' - 2\xi H_n' + 2nH_n = 0, \quad (7.37)$$

którego rozwiązaniami są *wielomiany Hermite'a*. Zamiast posługiwać się bezpośrednio równaniem (7.37) i związkami rekurencyjnymi (7.24), aby znaleźć jawną postać wielomianów  $H_n$  warto posłużyć się tzw. *funkcją tworzącą*  $F(\xi, u)$ :

$$F(\xi, u) = \exp(-u^2 + 2\xi u) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u^n}{n!} H_n(\xi). \quad (7.38)$$

Najpierw sprawdźmy, że tak zdefiniowane  $H_n$  spełniają równanie (7.37). W tym celu

zrózniczkujemy  $F(\xi, u)$  po  $\xi$

$$\begin{aligned}\frac{\partial F(\xi, u)}{\partial \xi} &= 2u \exp(-u^2 + 2\xi u) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} n \frac{u^n}{n!} H_{n-1}(\xi), \\ \frac{\partial F(\xi, u)}{\partial \xi} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u^n}{n!} H'_n(\xi)\end{aligned}\quad (7.39)$$

i po  $u$ :

$$\begin{aligned}\frac{\partial F(\xi, u)}{\partial u} &= 2(\xi - u) \exp(-u^2 + 2\xi u) = 2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u^n}{n!} (\xi H_n(\xi) - n H_{n-1}(\xi)), \\ \frac{\partial F(\xi, u)}{\partial u} &= \sum_{n=0}^{\infty} n \frac{u^{n-1}}{n!} H_n(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{u^n}{n!} H_{n+1}(\xi).\end{aligned}\quad (7.40)$$

Porównując współczynniki przy jednakowych potęgach  $u$  otrzymujemy użyteczne związki

$$\begin{aligned}H'_n &= 2n H_{n-1}, \\ H_{n+1} &= 2\xi H_n - 2n H_{n-1}.\end{aligned}\quad (7.41)$$

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 zrózniczkujemy po  $\xi$ :

$$H'_{n+1} - 2H_n - 2\xi H'_n + H''_n = 0$$

i zastosujemy pierwsze z równań (7.41) ale dla  $H'_{n+1}$ :

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

W ten sposób otrzymaliśmy (7.37).

Wiele własności wielomianów Hermite'a daje się udowodnić przy pomocy funkcji tworzącej. Jawną postać  $H_n$  można znaleźć zrózniczkując  $n$ -krotnie po  $u$  funkcję tworzącą (7.38):

$$H_n(\xi) = \left. \frac{\partial^n F(\xi, u)}{\partial u^n} \right|_{u=0}.\quad (7.42)$$

Z drugiej strony, ponieważ

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

A zatem

$$H_n(\xi) = (-)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-\xi^2}.\quad (7.43)$$

Warto wypisać kilka pierwszych wielomianów Hermite'a:

$$H_0(\xi) = 1, \quad H_1(\xi) = 2\xi, \quad H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2. \quad (7.44)$$

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

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi F(\xi, u) F(\xi, w) e^{-\xi^2} &= e^{2uw} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \exp \{ -\xi^2 + 2(u+w)\xi - (u+w)^2 \} \\ &= e^{2uw} \sqrt{\pi}, \end{aligned} \quad (7.45)$$

gdzie gaussowską całkę po  $d\xi$  wykonaliśmy zmieniając zmienne  $\xi' = \xi - (u+w)$ . Rozwijając obie strony (7.45) w szereg w  $u$  i  $w$  otrzymujemy

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

z czego wynika

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi H_m(\xi) H_n(\xi) e^{-\xi^2} = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{nm}. \quad (7.46)$$

A zatem unormowana funkcja falowa oscylatora harmonicznego ma postać:

$$\psi_n(x) = \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{2^n n!} \right)^{1/2} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \exp \left( -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right). \quad (7.47)$$