Глава 3

Едномерни стационарни задачи

3.5 Линеен хармоничен осцилатор

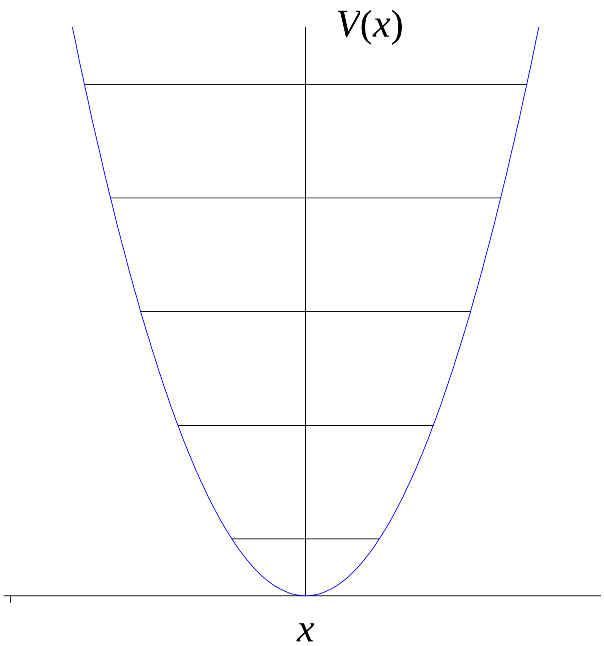
Линейният едномерен хармоничен осцилатор се описва със следната потенциалната енергия:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \tag{3.1}$$

Разглеждаме положителни енергии:

$$E > 0. \tag{3.2}$$

Потенциалът на хармоничния осцилатор е показан на фигура 3.1.



Фигура 3.1: Потенциална енергия на линейния хармоничен осцилатор.

Решаваме стационарното едномерно уравнение на Шрьодингер:

$$\hat{H}\Psi(x) = E\Psi(x), \tag{3.3}$$

където

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x). \tag{3.4}$$

Получаваме

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + \left[\frac{2m}{\hbar^2}E - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right]\Psi(x) = 0. \tag{3.5}$$

Търсим смяна на променливите, която да опрости уравнението, от вида

$$x = a\xi \quad\Longrightarrow\quad \frac{d}{dx} = \frac{1}{a}\frac{d}{d\xi}, \quad \frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{a^2}\frac{d^2}{d\xi^2}. \tag{3.6}$$

Заместваме в (3.5) и получаваме:

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\Psi(\xi) + \left[\left(\frac{2ma^2}{\hbar^2}\right)E - \left(\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}a^4\right)\xi^2\right]\Psi(\xi) = 0. \tag{3.7}$$

Следователно е удачно да изберем $a = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ и тогава имаме:

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \qquad \varepsilon = \frac{E}{E_0}, \qquad E_0 = \frac{\hbar^2}{ma^2} = \hbar\omega. \tag{3.8}$$

Уравнението (3.5) добива по-простия вид

$$\frac{d^2}{d\xi^2}\Psi(\xi) + \left(2\varepsilon - \xi^2\right)\Psi(\xi) = 0. \tag{3.9}$$

Това диференциално уравнение има две особени точки: в $x = -\infty$ и $x = +\infty$. За да отстраним тези особености, разглеждаме асимптотиката на последното уравнение при $|x| \to \infty$. Тогава членът с ξ^2 е много по-голям от този с 2ε и следователно:

$$\xi \to \pm\infty : \quad \frac{d^2}{d\xi^2}\Psi(\xi) - \xi^2\Psi(\xi) = 0. \tag{3.10}$$

Търсим решението на това диференциално уравнение във вида:

$$\Psi(\xi) = e^{b\xi^n} \quad (n > 0), \tag{3.11а}$$

$$\Longrightarrow \Psi'(\xi) = nb\xi^{n-1}e^{b\xi^n}, \tag{3.11б}$$

$$\Longrightarrow \Psi''(\xi) = \left[\left(nb\xi^{n-1}\right)^2 + n(n-1)b\xi^{n-1}\right]e^{b\xi^n}. \tag{3.11в}$$

Заместваме в уравнение (3.10) и получаваме:

$$\left(nb\xi^{n-1}\right)^2 - \xi^2 = 0. \tag{3.12}$$

Оттук намираме рекурентната формула

$$n = 2, \quad b = \pm\tfrac{1}{2}. \tag{3.13}$$

Понеже вълновата функция трябва да е квадратично интегруема, решението $b = \frac{1}{2}$ отпада. Отстраняването на особеността в $x = \pm\infty$ се постига с полагането:

$$\Psi(\xi) = e^{-\xi^2/2}Y(\xi), \tag{3.14}$$

откъдето намираме

$$\begin{aligned}\Psi'(\xi) &= e^{-\xi^2/2}\left[-\xi Y(\xi)+Y'(\xi)\right], && (3.15а)\\ \Psi''(\xi) &= e^{-\xi^2/2}\left[\left(\xi^2-1\right)Y(\xi)-2\xi Y'(\xi)+Y''(\xi)\right], && (3.15б)\end{aligned}$$

след което заместваме в уравнение (3.9) и получаваме:

$$Y''(\xi)-2\xi Y'(\xi)+(2\varepsilon-1)Y(\xi)=0. \tag{3.16}$$

Търсим решението за новата неизвестна функция $Y(\xi)$ във вид на ред по ξ:

$$\begin{aligned}Y(\xi) &= \sum\nolimits_{k=0}^{\infty} a_k\xi^k, && (3.17а)\\ Y'(\xi) &= \sum\nolimits_{k=1}^{\infty} k a_k\xi^{k-1}, && (3.17б)\\ Y''(\xi) &= \sum\nolimits_{k=2}^{\infty} k(k-1)a_k\xi^{k-2}=\sum\nolimits_{j=0}^{\infty}(j+1)(j+2)a_{j+2}\xi^j. && (3.17в)\end{aligned}$$

Заместваме в уравнение (3.16) и получаваме:

$$\sum\nolimits_{k=0}^{\infty}\left[(k+1)(k+2)a_{k+2}-2ka_k+(2\varepsilon-1)\,a_k\right]\xi^k=0. \tag{3.18}$$

Този ред може да е равен тъждествено на нула само ако коефициентът пред всяка степен на ξ е равен на нула. Оттук намираме

$$a_{k+2}=a_k\frac{2k+1-2\varepsilon}{(k+1)(k+2)} \qquad (k=0,1,2,\dots). \tag{3.19}$$

При големи стойности на k имаме

$$\frac{a_{k+2}}{a_k}\sim\frac{2}{k} \quad (k\to\infty). \tag{3.20}$$

Лесно е да се покаже, че същото асимптотично поведение имат коефициентите в Тейлъровото развитие на функцията $f(\xi)=e^{\xi^2}$. Наистина,

$$e^{\xi^2}=\sum\nolimits_{k=0}^{\infty}\frac{\xi^{2k}}{k!}=\sum\nolimits_{p=0}^{\infty}\frac{\xi^p}{(p/2)!}=\sum\nolimits_{p=0}^{\infty}c_p\xi^p, \qquad c_p=\frac{1}{(p/2)!}, \tag{3.21}$$

откъдето намираме

$$\frac{c_{p+2}}{c_p}=\frac{(p/2)!}{(p/2+1)!}=\frac{1}{p/2+1}\sim\frac{2}{p}. \tag{3.22}$$

Следователно имаме

$$\sum\nolimits_{k=0}^{\infty}a_k\xi^k\sim e^{\xi^2} \tag{3.23}$$

и затова

$$\Psi(\xi)=e^{-\xi^2/2}Y(\xi)\sim e^{\xi^2}e^{-\xi^2/2}=e^{\xi^2/2}, \tag{3.24}$$

което означава, че вълновата функция $\Psi(\xi)$ не е квадратично интегруема. Това означава, че редът (3.17а) трябва да бъде прекъснат при даден индекс $k=n$, т.е. редът трябва да се редуцира до крайна сума (полином). С други думи, съществува такова цяло число n, че

$$a_n\neq 0, \qquad a_{n+1}=a_{n+2}=a_{n+3}=\cdots=0. \tag{3.25}$$

Следователно имаме условието

$$a_{n+2} = a_n \frac{2n+1-2\varepsilon}{(n+1)(n+2)} = 0 \tag{3.26}$$

и понеже $a_n \neq 0$, то следва, че

$$\varepsilon \equiv \varepsilon_n = \frac{2n+1}{2}. \tag{3.27}$$

Последното условие означава квантуване на енергията:

$$E_n = \varepsilon_n \hbar\omega = \left(n + \tfrac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n = 0, 1, 2, \dots). \tag{3.28}$$

Първите няколко възможни енергии от енергетичния спектър са:

$$E_0 = \tfrac{1}{2}\hbar\omega, \quad E_1 = \tfrac{3}{2}\hbar\omega, \quad E_2 = \tfrac{5}{2}\hbar\omega, \quad E_3 = \tfrac{7}{2}\hbar\omega, \quad \dots \tag{3.29}$$

Първите няколко енергетични състояния са изобразени на фигура 3.1.

Следователно енергетичният спектър на хармоничния осцилатор има следните характерни черти:

1. Енергията се квантува, което се налага от условието за квадратична интегруемост на вълновата функция.

2. Енергията на основното състояние $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ е различна от нула (енергия на вакуума).

3. Енергетичните нива са еквидистантни, като разстоянието между кои да са две съседни нива е $\hbar\omega$.

4. Спектърът е неизроден, което е следствие от едномерността на задачата (виж теоремата от темата за безкрайна правоъгълна потенциална яма).

Нека сега да се върнем към вълновата функция $\Psi(\xi)$. От всичко казано дотук стигаме до извода, че тя има вида:

$$\Psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} Y(\xi), \qquad Y(\xi) = \sum\nolimits_{k=0}^{n} a_k \xi^k, \tag{3.30}$$

като коефициентите на полинома се намират от рекурентната връзка

$$a_{k+2} = a_k \frac{2k+1-2\varepsilon}{(k+1)(k+2)} \qquad (k = 0, 1, 2, \dots, n). \tag{3.31}$$

Ако n е четно число, то, понеже $a_{n+1} = 0$, от формула (3.31) намираме, че ${}_{n-1} = 0$, след това ${}_{n-3} = 0$ и т.н. Следователно $a_k = 0$ за всички нечетни k и полиномът $Y(\xi)$ съдържа само четни степени на ξ. Аналогично, ако n е нечетно число, то, понеже тогава a_{n+1} ще е четно и $a_{n+1} = 0$, от формула (3.31) намираме, че $a_k = 0$ за всички четни k. Следователно, полиномът $Y(\xi)$ ще е или четна функция при четно n, или нечетна функция при нечетно n.

Това свойство на четност е следствие от факта, че хармоничният потенциал (3.1) е симетрична функция на координатата. Тази теорема беше доказана по-рано в общия случай на произволен симетричен потенциал.

Полиномите $Y(\xi)$, дефинирани с рекурентната формула (3.31), са известни в математиката като полиноми на Ермит и се бележат с H_n.

Вълновата функция на състоянието на хармоничния осцилатор с енергия E_n окончателно се записва във вида:

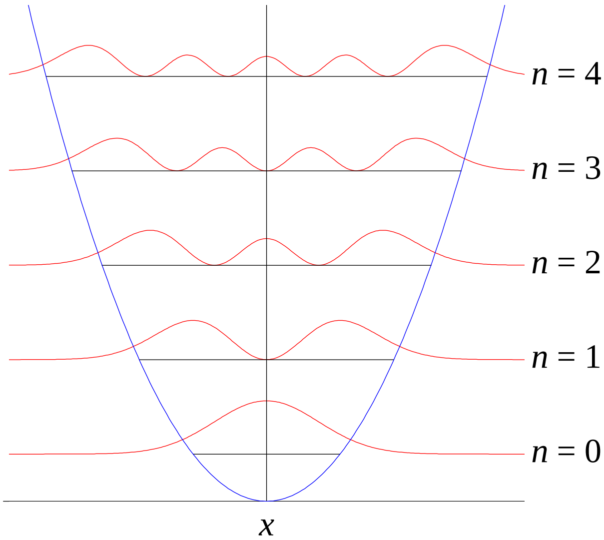
$$\Psi_n(x) = C_n e^{-\frac{1}{2}(x/a)^2} H_n(x/a), \tag{3.32}$$

където константата C_n се намира от условието за нормираност на $\Psi_n(x)$ и се дава с формулата

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \pi^{\frac{1}{2}} a}}. \tag{3.33}$$

Както обикновено, $|\Psi_n(x)|^2$ дава вероятността за намирането на частицата в точка x. Първите няколко полинома на Ермит са:

$H_0(x) = 1$; $H_1(x) = 2x$; $H_2(x) = 4x^2-2$; $H_3(x) = 8x^3-12x$; $H_4(x) = 16x^4-48x^2+12$; ...



Фигура 3.2: Вероятностни разпределения за първите няколко енергетични състояния на линейния хармоничен осцилатор.

Вълновите функции на първите няколко състояния на хармоничния осцилатор са:

$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi^{\frac{1}{2}} a}} e^{-\frac{1}{2}(x/a)^2}, \tag{3.34а}$$

$$\Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} a}} \frac{2x}{a} e^{-\frac{1}{2}(x/a)^2}, \tag{3.34б}$$

$$\Psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi^{\frac{1}{2}} a}} \left(\frac{2x^2}{a^2} - 1\right) e^{-\frac{1}{2}(x/a)^2}, \tag{3.34в}$$

$$\Psi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{3\pi^{\frac{1}{2}} a}} \left(\frac{2x^3}{a^3} - \frac{3x}{a}\right) e^{-\frac{1}{2}(x/a)^2}, \tag{3.34г}$$

$$\Psi_4(x) = \frac{1}{\sqrt{24\pi^{\frac{1}{2}} a}} \left(\frac{4x^4}{a^4} - \frac{12x^2}{a^2} + 3\right) e^{-\frac{1}{2}(x/a)^2}, \tag{3.34д}$$

$$\ldots$$

Вълновите функции на хармоничния осцилатор имат следните свойства:

1. Вероятността частицата да бъде намерена извън класическия интервал на движение, т.е. в "стените" на потенциала $V(x)$, е ненулева.
2. Вълновите функции са четни за четно квантово число n и нечетни за нечетно n.
3. Всяко състояние $\Psi_n(x)$ има n възли, т.е. точки, в които $\Psi_n(x) = 0$.

Фигура 3.2 показва $|\Psi_n(x)|^2$ за първите няколко състояния на хармоничния осцилатор.