Kvantummechanika VI.

Harmonikus oszcillátor

Klasszikus paradigma: $F = -kx = m\frac{d^2x}{dt^2}$, $x(t) = A\sin(\omega t) + B\cos(\omega t)$

ahol: $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ (parabola)

→ Általánosan jó közelítés lokális minimumokra:

$$V(x) = \underbrace{V(x_0)}_{\text{tetszőleges konst}} + \underbrace{V'(x_0)}_{0!}(x-x_0) + \frac{1}{2}V''(x_0)(x-x_0)^2 + \dots$$

$$V(x) \cong \frac{1}{2}V''(x_0)(x-x_0)^2 = \frac{1}{2}k(x-x_0)^2 \longrightarrow V''(x_0) = k$$

Kvantummechanika: Feladat: megoldani az időfüggetlen Schrödinger-egyenletet a fenti potenciálra

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

I. Az algebrai metódus: Átalakítjuk a Sch.-egyenletet:

$$\frac{1}{2m}\left[p^2 + (m\omega x)^2\right]\psi = E\psi$$

→ Alap ötlet: $a^2+b^2 = (a+ib)(a-ib)$. → Bár az operátorok nem kommutálnak jelenszően:

$$a_+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-ip + m\omega x\right) \quad ; \quad a_- = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(ip + m\omega x\right)$$

$$a_-a_+ = \frac{1}{2\hbar m\omega}\left(ip + m\omega x\right)\left(-ip + m\omega x\right) = \frac{1}{2\hbar m\omega}\left(p^2 + (m\omega x)^2 + ipm\omega x - im\omega xp\right)$$

$$= \frac{1}{2\hbar m\omega}\left(p^2 + (m\omega x)^2\right) + \frac{i}{2\hbar}\underbrace{[p, x]}_{-i\hbar} = \boxed{\frac{1}{\hbar\omega}H + \frac{1}{2}} = a_-a_+$$

→ Hasonlóan: $\boxed{a_+a_- = \frac{1}{\hbar\omega}H - \frac{1}{2}}$

→ A Hamilton-op, ~így a Schrödinger egyenlet:

$$H = \hbar\omega\left(a_\pm a_\mp \pm \frac{1}{2}\right) \longrightarrow \hbar\omega\left(a_\pm a_\mp \pm \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi$$

→ Ha ψ kielégíti a Schrödinger egyenletet E energiával, akkor $a_+\psi$ is, de $E+\hbar\omega$ energiával:

$$H(a_+\psi) = (E+\hbar\omega)(a_+\psi) \longrightarrow H(a_-\psi) = (E-\hbar\omega)(a_-\psi)$$

→ Kell egy minimum, ahol $a_-\psi_0 = 0$ → ezt megoldjuk:

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(ip + m\omega x\right)\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\underbrace{\hbar\frac{d\psi_0}{dx} + m\omega x\psi_0}_{0\,!}\right) = 0$$

$$\longrightarrow \frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega x}{\hbar}\psi_0 \longrightarrow \frac{d\psi_0}{\psi_0} = \frac{-m\omega x}{\hbar}dx \longrightarrow \psi_0 = A\,e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

→ <u>Normáljuk</u>: $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty}|A|^2 e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx = 2|A|^2\int_0^{\infty} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx = 2|A|^2\cdot\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} = 1$

$$\longrightarrow A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

⇒ Az alapállapoti hullámfüggvény: $\boxed{\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}}$

→ Az ehhez tartozó alapállapoti energia:

$$H\psi_0 = \hbar\omega\left(a_+a_- + \frac{1}{2}\right)\psi_0 = E_0\psi_0 \longrightarrow \frac{1}{2}\hbar\omega\cancel{\psi_0} = E_0\cancel{\psi_0}$$

$$\boxed{E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega} \qquad (\text{ami: } a_-\psi_0 \overset{!}{=} 0)$$

→ <u>Tetszőleges állapota</u>:

$$\boxed{\psi_n(x) = A_n(a_+)^n\psi_0(x)} \quad \text{és} \quad \boxed{E_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega}$$

<u>További ⊕</u>: $a_+\psi_n = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}$ és $a_-\psi_n = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(a_+ + a_-\right) \quad ; \quad p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(a_+ - a_-\right)$$

Analitikus módszer:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi=E\psi \longrightarrow \xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

→ Ekkor: $d\xi=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}dx$; $d\xi^2=\frac{m\omega}{\hbar}dx^2$; $dx^2=\frac{\hbar\, d\xi^2}{m\omega}$, $x^2=\frac{\hbar\xi^2}{m\omega}$, így:

$$-\frac{\hbar^2}{2\cancel{m}}\cdot\frac{d^2\psi}{d\xi^2}\cdot\frac{\cancel{m}\omega}{\cancel{\hbar}}+\frac{1}{2}\cancel{m}\omega^2\cdot\frac{\hbar\xi^2}{\cancel{m}\cancel{\omega}}\psi=E\psi \longrightarrow -\frac{\hbar\omega}{2}\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+\frac{\hbar\omega}{2}\xi^2\psi=E\psi$$

→ Legyen $\boxed{\frac{2E}{\hbar\omega}=K}$, ekkor: $\boxed{\frac{d^2\psi}{d\xi^2}=(\xi^2-K)\psi}$

→ Ez ugyanaz a Schrödinger egyenlet, melynek az általános megoldását keressük. Ha $\xi^2 \gg K$, akkor

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}\approx\xi^2\psi \longrightarrow \psi(\xi)=Ae^{-\xi^2/2}+Be^{\xi^2/2} \rightarrow B\overset{!}{=}0$$

→ A fizikailag elfogadható megoldások alakja: $\psi(\xi)=(\ )e^{-\xi^2/2}$

→ Általánosan: $\psi(\xi)=h(\xi)e^{-\xi^2/2}$

→ Előállítjuk a deriváltakat:

$$\frac{d\psi}{d\xi}=\left(\frac{dh}{d\xi}-\xi h\right)e^{-\xi^2/2} \longrightarrow \frac{d^2\psi}{d\xi^2}=\left(\frac{d^2h}{d\xi^2}-2\xi\frac{dh}{d\xi}+(\xi^2-1)h\right)e^{-\xi^2/2}$$

→ Behelyettesítve a Schrödinger-egyenletbe:

$$\frac{d^2h}{d\xi^2}-2\xi\frac{dh}{d\xi}+(\xi^2-1)h=(\xi^2-K)h \Rightarrow \underline{\frac{d^2h}{d\xi^2}-2\xi\frac{dh}{d\xi}+h(K-1)=0}$$

→ A megoldást hatványsorok segítségével keressük:

$$h(\xi)=a_0+a_1\xi+a_2\xi^2+\ldots=\sum_{n=0}^{\infty}a_n\xi^n$$

$$\frac{dh(\xi)}{d\xi}=a_1+2a_2\xi+3a_3\xi^2+\ldots=\sum_{n=0}^{\infty}n\,a_n\xi^{n-1}$$

$$\frac{d^2h(\xi)}{d\xi}=2a_2+6a_3\xi+12a_4\xi^2+\ldots=\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)(n+2)\,a_{n+2}\xi^n$$

Behelyettesítünk:

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left[(n+1)(n+2)a_{n+2} - 2n a_n + (K-1)a_n\right]\xi^n = 0$$

→ Az összes hatvány együtthatója nulla kell tehát legyen:

$$(n+1)(n+2)a_{n+2} - 2n a_n + (K-1)a_n = 0$$

$$\hookrightarrow \boxed{a_{n+2} = \frac{(2n+1-K)a_n}{(n+1)(n+2)}}$$

→ Ez a rekurziós formula teljes mértékben egyenértékű a Schrödinger-egyenlettel.

→ a_0-tól indulva előállítja a páros együtthatókat:

$$a_2 = \frac{1-K}{2}a_0 \; ; \quad a_4 = \frac{5-K}{12}a_2 = \frac{(5-K)(1-K)}{24}a_0$$

→ a_1-től indulva pedig a páratlanokat:

$$a_3 = \frac{2+1-K}{2\cdot 3}a_1 = \frac{3-K}{6}a_1 \; ; \quad \dots$$

→ Az ált. mego: $h(\xi) = h_{pttlan}(\xi) + h_{páros}(\xi)$, ahol:

$$h_{páros}(\xi) = a_0 + a_2\xi^2 + a_4\xi^4 + \dots$$

$$h_{pttlan}(\xi) = a_1\xi + a_3\xi^3 + a_5\xi^5 + \dots$$

→ Nagy n-ekre: $a_{n+2} \approx \frac{2}{n}a_n$, ahol $a_n \approx \frac{C}{(n/2)!}$ /C = const./, amiket az eredménye:

$$h(\xi) = C\sum\frac{1}{(n/2)!}\xi^n \approx C\sum\frac{1}{n!}\xi^{2n} \approx Ce^{\xi^2}$$

→ Ha $h(\xi) \cong e^{\xi^2}$ alakú, akkor $\psi(\xi) \sim e^{\xi^2/2}$ alakú, ami nem normálható. → A normálhatóság érdekében léteznie kell egy legnagyobb n-nek, melyre $a_{n+2} = 0$-t eredményez.

→ Fizikailag elfogadható megoldásokra: $K = 2n+1$ $(n = 0, 1, 2, 3, \dots)$

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

Ha $K = 2m+1$:

$$a_{n+2} = \frac{-2(m-n)}{(n+1)(n+2)} a_n \quad \rightarrow \text{Ha } m=0, \rightarrow a_1 = 0,\ a_2 = 0, \text{ tehát:}$$

$$h_0(\xi) = a_0 \longrightarrow \psi_0(\xi) = a_0 e^{-\xi^2/2} \rightarrow \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}$$

$$\rightarrow \text{Ha } m=1, \longrightarrow a_0 = 0,\ a_3 = 0$$

$$h_1(\xi) = a_1 \xi \longrightarrow \psi_1(\xi) = a_1 \xi e^{-\xi^2/2}$$

$$\rightarrow \text{Ha } m=2 \longrightarrow n=0:\ a_2 = -2a_0$$

$$h_2(\xi) = a_0(1-2\xi^2) \longrightarrow \psi_2(\xi) = a_0(1-2\xi^2)e^{-\xi^2/2}$$

→ Általánosan: $h_n(\xi)$ egy n-ed fokú polinomja ξ-nek. Ha n páratlan, akkor csak páratlan, ha n páros, akkor csak páros hatványokat tartalmaz.

→ Az a_0 és a_1 tényezőket nem nálunk a Hermite-polinomoknak nevezzük őket.

$$\boxed{\begin{aligned} \psi_n &= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2} \\ H_n(\xi) &= (-1)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2} \end{aligned}}$$