Kwantowy oscylator harmoniczny

Miron Nowak

Marzec 2017

1 Oscylator harmoniczny

Oscylator harmoniczny – układ drgający, poddany działaniu sił sprężystych tj. sił proporcjonalnych do przemieszczenia **r** układu od położenia równowagi:

$$F(r) = -kr$$

gdzie k – tzw. stała sprężystości.

W ogólności **r** oznacza położenie układu w przestrzeni konfiguracyjnej. Model oscylatora harmonicznego pojawia się w różnych działach fizyki, przy czym przez oscylator harmoniczny rozumie się często bardzo odmienne układy fizyczne, np. drgające wahadło, drgającą cząsteczkę czy drgający układ elektryczny. Wyróżnia się klasyczny oscylator harmoniczny oraz kwantowy oscylator harmoniczny. Ten ostatni stosuje się do układów mikroskopowych, dla których prawa fizyki klasycznej przestają być słuszne.

Energia potencjalna oscylatora zależy od kwadratu przemieszczenia **r** od położenia równowagi:

$$V(r) = \frac{k}{2}r^2$$

Energia potencjalna w tej postaci jest najprostszą postacią potencjału, która pojawia się w przypadku drgań układów. Inne potencjały to:

- potencjał stały **V(r)=const** dotyczy ruchu układu swobodnego, tj. nie poddanego działaniu żadnych sił zewnętrznych (np. cząstka swobodna; cząstka ta porusza się ze stałą prędkością w przestrzeni);
- potencjał liniowy **V(r)=cr**, gdzie c – stała liczba:
  - w mechanice klasycznej potencjał ten oznacza, że na układ działa stała siła;
  - w mechanice kwantowej potencjał liniowy wymaga doprecyzowania, gdyż bez określenia warunków brzegowych problem jest źle postawiony (odpowiednie rozwiązanie równania Schrödingera bez warunków brzegowych ma nieograniczone z dołu widmo).

2 Klasyczny oscylator harmoniczny

Klasyczny oscylator harmoniczny – realizacja modelu oscylatora harmonicznego w ramach mechaniki klasycznej.

Klasyczny oscylator harmoniczny określa się jako układ w potencjale kwadratowym:

$$U = \frac{m\omega^2}{2}x^2$$

bądź równoważnie jako układ, w którym działa liniowa siła F proporcjonalna do wychylenia z przeciwnym zwrotem **x**

$$\vec{F} \sim -\vec{-x}$$

Jednowymiarowym oscylatorem harmonicznym jest każdy układ fizyczny, którego zachowanie można opisać równaniem zwanym równaniem oscylatora harmonicznego:

$$a(t) + \omega_0^2 x(t) = 0$$

gdzie:

- a(t) – przyspieszenie zależne od czasu,
- x(t) – położenie zależne od czasu,
- ω_0 – częstość kołowa drgań oscylatora.

Związek ten można zapisać jawnie jako liniowe równanie różniczkowe:

$$\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \omega_0^2 x(t) = 0$$

lub:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0$$

Model opisywany powyższym równaniem jest również czasami nazywany prostym oscylatorem harmonicznym. Każdy układ, którego równanie można sprowadzić do powyższego, określa się w skrócie jako oscylator harmoniczny. Rozwiązanie równania oscylatora harmonicznego można zapisać w jednej z poniższych równoważnych postaci:

$$x(t) = A\sin(\omega_0 t) + B\cos(\omega_0 t)$$
$$x(t) = C\sin(\omega_0 t + \varphi)$$
$$x(t) = D\cos(\omega_0 t + \varphi')$$
$$x(t) = Fe^{i\omega_0 t} + Ge^{-i\omega_0 t}$$

gdzie $A, B, C, \varphi, D, \varphi', F, G$ to stałe zależne od warunków początkowych.

ω_0 jest częstością kołową oscylatora harmonicznego. Okres drgań **T** wynosi:

$$T = \frac{2\pi}{\omega_0}$$

natomiast częstotliwość drgań ν wynosi:

$$\nu = \frac{\omega_0}{2\pi}.$$

3 Kwantowy oscylator harmoniczny

3.1 Mechanika kwantowa - podstawowe pojęcia

1. Mechanika kwantowa jest mechaniką operatorów.

$$\Theta(r,p) \to \hat{\Theta}(r, -i\hbar\nabla).$$

2. Operatory działają na zespoloną funkcję falową:

$$\psi(r,t).$$

3. Gęstość prawdopodobieństwa wyraża się następująco:

$$\varrho(r,t) = |\psi|^2 = \psi * \psi.$$

4. Wartość średnia wielkosci fizycznych:

$$< \Theta >= \int d^3r\psi * \hat{\Theta}\psi$$

5. Hamiltonian dla pojedynczej cząstki w potencjale niezależnym od czasu:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r).$$

6. Równaniem opisującym ewolucję czasowo-przestrzenną funkcji falowej w przypadku nierelatywistycznym jest równanie Schrödingera:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = (-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V)\psi.$$

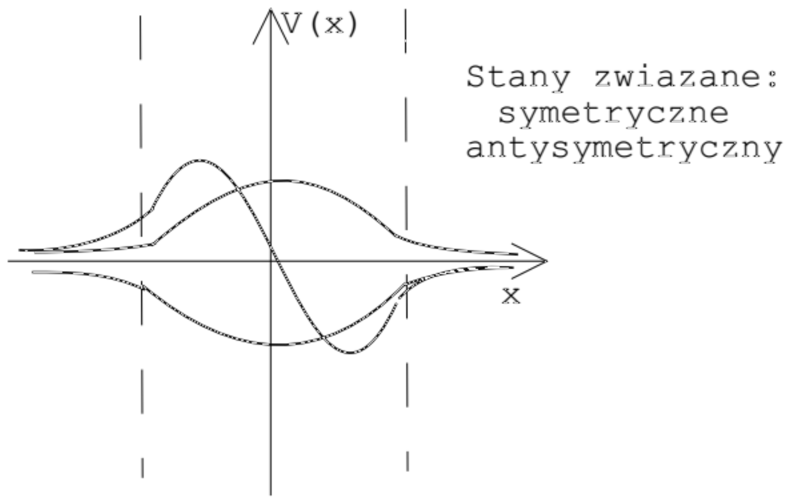
7. Funkcja falowa dla dlapotencjału niezależnego od czasu:

$$\psi(r,t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}}\psi_E(r).$$

8. Otrzymujemy wówczas równania Schrödingera niezależne od czasu:

$$\hat{H}\psi_E = E\psi_E$$

gdzie E jest wartością własną operatora energii, czyli hamiltonianu.



Anatomia funkcji falowej

Istnieją tylko dwa klasyczne przykłady, które można skwantować otrzymując pełne rozwiązanie w sposób jawny. Jest to oscylator harmoniczny i potencjał kulombowski (atom wodoru).

3.2 Oscylator harmoniczny

Hamiltonian dla oscylatora harmonicznego (jednowymiarowego):

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$$

Szukane rozwiązanie ma postać: $x(t) = e^{i\omega t}$. Zatem: $\dot{x} = i\omega e^{i\omega t}$, $\ddot{x} = -\omega^2 x$. Czestość drgań nie zależy od amplitudy i w klasycznym podejściu wynosi:

$$\omega_{kl} = \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

3.3 Kwantowomechaniczny jednowymiarowy oscylator harmoniczny

Hamiltonian dla oscylatora kwantowego:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{k}{2}x^2.$$

Z działania hamiltonianu na funkcję $\hat{H}\psi_E = E\psi_E$ otrzymujemy następujące równanie:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + \frac{k}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x).$$

Chcemy znaleźć rozwiązanie wskazujące na stan o najniższej energii. Postujujemy więc rozwiazanie postaci $\psi = e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$. Stąd $\psi' = e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}(-\alpha x)$, $\psi'' = e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}(-\alpha^2 x^2 - \alpha)$. Po podstawieniu do wcześniejszego równania otrzymujemy równanie:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(-\alpha^2 x^2 - \alpha) + \frac{k}{2}x^2 = E.$$

Z tego równania otrzymujemy wyrażenie na najniższą energie:

$$E = \frac{\hbar^2 \alpha}{2m}.$$

gdzie czynnik α wyraża się następująco:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(-\alpha^2 x^2 - \alpha) = \frac{k}{2} \Rightarrow \hbar^2 \alpha^2 = km \Rightarrow \alpha = \frac{\sqrt{km}}{\hbar}.$$

Szukając związku między oscylatorem kwantowym i klasycznym wykonujemy następujące przekształcenia:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\sqrt{km}}{\hbar} = \frac{\hbar\sqrt{km}}{2m} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{km}{m^2}} = \frac{\hbar}{2}\omega_{kl}.$$

Czyli energia oscylatora kwantowego wyrażona za pomocą częstości drgań oscylatora klasycznego wynosi:

$$E = \frac{\hbar}{2}\omega_{kl}.$$

Cała klasa rozwiązań równania wyrażona jest następująco:

$$\psi_n(x) = W_n(x) e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}.$$

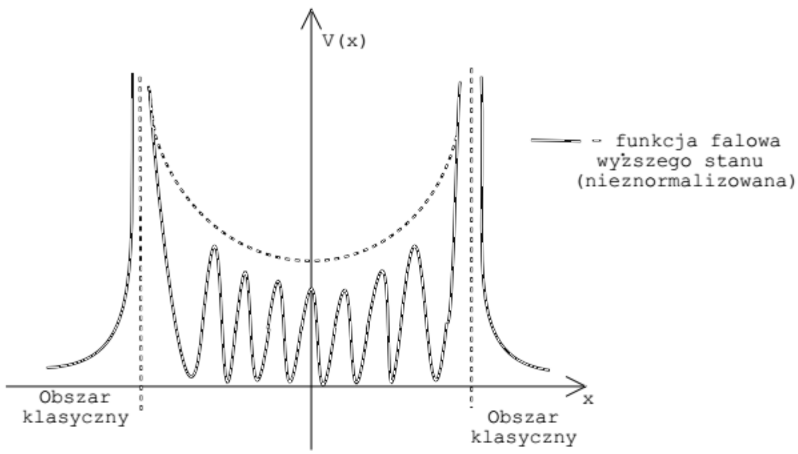
Wówczas dla:

- n = 0: $\psi_0(x) = N_0 e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$ - stan podstawowy
- n = 1: $\psi_0(x) = N_1 x e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$ - stan podstawowy

Klasyczne prawdopodobieństwo P(x) znalezienia cząstki w punkcie x jest proporcjonalne do odwrotności jej prędkości:

$$P(x) \sim \frac{1}{v(x)} = \frac{m}{p(x)} = \frac{m}{\sqrt{2m(E - V(x))}}$$

Kwantowomechaniczne prawdopodobieństwo uśrednia się do klasycznego rozkładu prawdopodobieństwa:



Literatura

[1] dr hab. Ernest Aleks Bartnik
Mechanika Kwantowa - Notatki z wykładów.

[2] Astrofizyka/Kwantowy oscylator harmoniczny
https://pl.wikibooks.org/wiki/Astrofizyka/Kwantowy$_{o}scylator_{h}armoniczny$

[3] Mechanika kwantowa/Kwantowy oscylator harmoniczny
https://pl.wikibooks.org/wiki/Mechanika$_{k}wantowa/Kwantowy_{o}scylator_{h}armoniczny$

[4] Oscylator harmoniczny
https://pl.wikipedia.org/wiki/Oscylator$_{h}armoniczny$

[5] The quantum harmonic oscillator
https://helentronica.com