6. predavanje

Vladimir Dananić

7. studeni 2011.

Sadržaj

Jednodimenzijski harmonički oscilator

U klasičnoj fizici elastična energija, koja raste s kvadratom udaljenosti čestice od ravnotežna položaja, uzrokuje titranje čestice s određenom amplitudom i frekvencijom. U jednom se trenutku ukupna energija može očitovati samo kao elastična energija, a u nekom drugom trenutku samo kao kinetička energija čestice. Ta dva posebna trenutka u gibanju čestice označavamo kao dostizanje najveće udaljenosti od ravnotežna položaja odnosno kao prolaz čestice kroz ravnotežni položaj. Gibanje je čestice periodičko, što nuždno znači i prostorno ograničeno. Svaki sustav ima svoje stabilne položaje (da ih nema, ne bi sustava ni bilo) oko kojih se može odvijati gibanje čestica sustava. U neposrednoj blizini stabilnoga položaja možemo potencijalnu energiju čestice približno opisati elastičnom potencijalnom energijom $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$, gdje je m masa čestice, ω frekvencija titranja, a x je udaljenost čestice od ravnotežna položaja. Ako je x dovoljno mali tada imamo harmonički oscilator. Za veće x elastična potencijalna energija više ne opisuje dobro gibanje čestice, nego imamo tzv. anharmoničko titranje.

Jednodimenzijski harmonički oscilator

Upravo su titranja s dovoljno malom amplitudom osnovom za mnoge spektroskopijske metode. Načini titranja pojedinačnih atoma u molekuli pružaju nam mnoge i različite informacije o molekuli, prije svega o jakosti određene veze. No, to je sve klasični opis harmoničkoga titranja. Kako izgleda kvantnomehaničko titranje i što nam ono uopće pokazuje? Tu se moramo prisjetiti samih početaka kvantne mehanike, odnosno Planckove hipoteze. Naime, energija harmoničkoga oscilatora ne može imati bilo koju vrijednost, kao u klasičnoj mehanici, nego mora biti jednaka cjelobrojnom umnošku osnovne količine energije–kvanta– pri čemu je energija kvanta razmjerna frekvenciji titranja. Sada ćemo rješavanjem stacionarne Schrödingerove jednadžbe pokazati da je Planckova hipoteza "dobro ugrađena" u Schrödingerovu jednadžbu, tj. da su vlastite vrijednosti hamiltonijana harmoničkoga oscilatora (energijski spektar) u skladu s Planckovom hipotezom. I na tome ćemo se primjeru uvjeriti da kvantnomehaničko gibanje ima jedinstveno svojstvo; naime da postoji i za najnižu moguću energiju, za razliku od klasičnog oscilatora.

Jednodimenzijski harmonički oscilator

Hamiltonijan H harmoničkoga oscilatora jednak je:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \tag{1}$$

gdje je p operator količine gibanja, a x je operator položaja. Stacionarna Schrödingerova jednadžba ima oblik:

$$H\Psi = E\Psi \tag{2}$$

U jednadžbi (2) namjerno nije istaknuta nikakva ovisnost vektora stanja Ψ o prostornoj koordinati ili bilo čemu drugome. Harmonički oscilator, odnosno jednadžba (2), primjer je kvantnomehaničkoga sustava koji se može egzaktno opisati na različite načine, uključujući u to i algebarske metode u kojima se vektor stanja Ψ ne mora predočiti kao nekakva funkcija prostorne koordinate. Najprije ćemo riješiti "uobičajenu" Schrödingerovu jednadžbu, koja je diferencijalna jednadžba drugoga reda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + \frac{m\omega^2}{2}x^2\Psi(x) = E\Psi(x) \tag{3}$$

Jednodimenzijski harmonički oscilator

Jednadžbu ćemo (3) prevesti u bezdimenzijski oblik zamjenom nezavisne varijable $x = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} z$ i uvođenjem parametra $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$. Parametar je λ očito razmjeran energiji–to je energija izražena u jedinicama $\frac{\hbar\omega}{2}$, a z je nova, bezdimenzijska, nezavisna varijabla koja se nalazi u intervalu $-\infty < z < +\infty$. Dobivamo sljedeću jednadžbu:

$$\Psi''(z) + \left(\lambda - z^2\right)\Psi(z) = 0 \tag{4}$$

Naš se zadatak svodi na to da pronađemo takav parametar λ u jednadžbi (4) za koji postoji normalizabilno rješenje, tj. takvo da vrijedi

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\Psi(z)\right|^2 dz = 1 \tag{5}$$

Razumije se da jednadžbu (4) možemo numeričkim metodama riješiti za bilo koji parametar λ. Takvo rješenje, međutim, uglavnom ne će zadovoljavati uvjet normalizacije (5).

Jednodimenzijski harmonički oscilator

Po izrazom "uglavnom" mislimo na jako malu vjerojatnost da odaberemo upravo takav parametar λ i upravo takve početne uvjete $\Psi(0)$ i $\Psi'(0)$ da dobiveno rješenje bude normalizabilno. Najprije proučimo neka opća svojstva jednadžbe (4) i njezinih mogućih rješenja.

- Jednadžba se (4) ne će promijeniti ako umjesto z odaberemo $-z$. To znači da jednadžba ima parna i neparna rješenja, tj. rješenja sa svojstvom $\Psi(-z) = \Psi(z)$ odnosno $\Psi(-z) = -\Psi(z)$. Svako se drugo rješenje može prikazati kao linearni spoj tih dviju vrsta rješenja. Dakle, ubuduće ćemo tražiti parna ili neparna rješenja.
- Druga derivacija funkcije sadrži informaciju o zakrivljenosti krivulje koju funkcija opisuje, na sličan način kao što prva derivacija sadrži informaciju o smjeru mijenjanja funkcije, tj. hoće li se funkcijske vrijednosti smanjivati ili povećavati kako se od određene točke z mičemo na desno ili na lijevo od nje.

Jednodimenzijski harmonički oscilator

- Kao što prvu derivaciju funkcije u određenoj točci predočavamo pravcem što prolazi tom točkom i dodiruje krivulju, tako drugu derivaciju funkcije u istoj točci možemo predočiti određenom parabolom što prolazi tom točkom i dodiruje krivulju. Kao što pravac može biti nagnut na desno ili na lijevo, tako parabola može biti okrenuta prema gore ili prema dolje. U prvom slučaju imamo pozitivnu, a u drugom slučaju negativnu zakrivljenost. Ako zakrivljenost ne mijenja svoj smisao kako mijenjamo nezavisnu varijablu z, jasno je da će funkcijske vrijednosti rasti, prema gore ili prema dolje. U tom slučaju funkcija $\Psi(z)$, kojoj je smisao zakrivljenosti uvijek jedan te isti, ne može biti normalizabilna.
- Ako u jednadžbu (4) uvrstimo parametar $\lambda \leq 0$, zaključujemo da se predznak zakrivljenosti valne funkcije ne će mijenjati jednostavno zato što je $\lambda - z^2$ uvijek negativno. To znači da za te vrijednosti parametra λ jednadžba (4) nema normalizabilnih rješenja. To je po očekivanju, jer harmonički oscilator ne može imati negativnu energiju.

Jednodimenzijski harmonički oscilator

- Međutim, klasični oscilator može imati energiju jednaku 0, a to je slučaj kada čestica miruje. Kvantnomehanički oscilator ne može imati energiju $E = 0$ jer za parametar $\lambda = 0$ jednadžba (4) nema normalizabilnih rješenja. Kvantnomehanički harmonički oscilator ne može potpuno mirovati. Uvijek postoji kvantno gibanje.

Rješavanje diferencijalne jednadžbe (4) za parametar $\lambda > 0$ i normalizabilnu funkciju $\Psi(z)$ započinjemo ispitivanjem asimptotskog ponašanja funkcije $\Psi(z)$, tj. ponašanje te funkcije kada $z \to \pm\infty$. Označimo s $\Psi_\infty(z) = \lim\limits_{z\to\pm\infty} \Psi(z)$. Tada funkcija $\Psi_\infty(z)$ zadovoljava jednadžbu:

$$\Psi''_\infty(z) - z^2\Psi_\infty(z) = 0 \tag{6}$$

Jednadžba (6) ima normalizabilno rješenje $\Psi_\infty(z) \propto e^{-\frac{1}{2}z^2}$. Razumije se, to rješenje nije egzaktno, nego vrijedi u granici kada je iznos od z puno veći od 1, tj. kada se 1 može zanemariti kao pribrojnik od z.

Jednodimenzijski harmonički oscilator

Egzaktno rješenje jednadžbe (4) potražit ćemo u obliku $\Psi(z) = e^{-\frac{1}{2}z^2} F(z)$. Tada za funkciju $F(z)$ dobivamo jednadžbu:

$$F''(z) - 2zF'(z) + (\lambda - 1)\, F(z) = 0 \tag{7}$$

Bez smanjenja općenitosti, funkciju $F(z)$ u jednadžbi (7) možemo odabrati parnom ili neparnom. To također znači da možemo proučavati rješenja jednadžbe (7) na intervalu $0 \leq z < +\infty$. Sada ćemo proučiti te dvije mogućnosti.

1. $F(z)$ je parna funkcija. To znači $F(z) \equiv G(z^2)$. Zamjenom $w = z^2$ jednadžbu (7) prevodimo u oblik

$$wG''(w) + \left(\frac{1}{2} - w\right) G'(w) + \frac{1}{4}\,(\lambda - 1)\, G(w) = 0 \tag{8}$$

Jednodimenzijski harmonički oscilator

2. Funkcija $F(z)$ je neparna, što znači da ima oblik $F(z) = zG(z^2)$. Zamjenom $w = z^2$ jednadžbu (7) prevodimo u oblik

$$wG''(w) + (1-w)\,G'(w) + \frac{1}{4}(\lambda - 3)\,G(w) = 0 \tag{9}$$

Jednadžba (9) očito je istoga oblika kao i jednadžba (8). Zato ćemo promatrati jednadžbu oblika:

$$wG'' + (c-w)\,G' - aG = 0 \tag{10}$$

koje se zove **konfluentna hipergeometrijska jednadžba**. Njezino se rješenje $G(a;c;w)$ može prikazati u obliku reda:

$$G(a;c;w) = \sum_{n=0} \frac{a^{(n)}}{n!c^{(n)}} w^n \tag{11}$$

gdje je $a^{(n)} = a(a+1)....(a+n-1)$ uz definiciju $a^{(0)} = 1$. Oznaka je $a^{(n)}$ zapravo poopćenje faktorijele na realne i kompleksne brojeve.

Jednodimenzijski harmonički oscilator

Konfluentna se hipergeometrijska funkcija (11) za velike vrijednosti $w \to +\infty$ ponaša kao e^w. To bi značilo da da se valna funkcija $\Psi(z)$ za iste vrijednosti w ponaša kao $e^{-\frac{1}{2}z^2}e^{+z^2} = e^{+\frac{1}{2}z^2}$, tj. da divergira. Zato moramo hipergeometrijski red negdje prekinuti, odnosno vrijednost parametra a mora biti jednaka nekom negativnom prirodnom broju. Dakle, normalizabilnost zahtijeva $a = -n = -1, -2, -3....$ Budući da je $a = -\frac{1}{4}(\lambda - 1)$ za parne funkcije, odnosno $a = -\frac{1}{4}(\lambda - 3)$ za neparne funkcije, to znači da će parametar λ biti kvantiziran. No, najvažniji je zaključak da valna funkcija, kao rješenje polazne jednadžbe (4), mora imati sljedeći oblik:

$$\Psi_n(z) = N_n e^{-\frac{1}{2}z^2} H_n(z) \tag{12}$$

gdje je $n = 0, 1, 2...$, a $H_n(z)$ je polinom $n-$tog stupnja, poznat kao Hermiteov polinom. Pri tome parametar λ mora biti jednak $\lambda \equiv \lambda_n = 2n + 1$, tj. energija $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$.

Harmonički oscilator–algebarski način

Schrödingerova se jednadžba (2) može riješiti algebarskom metodom. To slijedi iz činjenice što je hamiltonijan harmoničkoga oscilatora (1) u biti zbroj kvadrata operatora položaja i količine gibanja. Zbroj se kvadrata može rastaviti na faktore, pri čemu je svaki faktor kompleksna veličina. Budući da je riječ o operatorima, moramo uzeti u obzir da je važan poredak kojim se operatori množe. Naprimjer, $A^2 + B^2 = (A + iB)(A - iB) + i[A, B]$. Zbog postojanja komutatora $[A, B]$ uzet ćemo simetrizirani umnožak, tj. $A^2 + B^2 = \frac{1}{2}\left[(A + iB)(A - iB) + (A - iB)(A + iB)\right]$. U rastavljanju hamiltonijana (1) na simetrizirani umnožak dvaju operatora, nastojat ćemo uzeti operatore koji su bez dimenzije, tj. kojima je mjerna jedinica jednak 1. Hamiltonijan se $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$ može prikazati na sljedeći način:

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}\left(aa^\dagger + a^\dagger a\right) \tag{13}$$

Harmonički oscilator–algebarski način

gdje su operatori a i $a^\dagger$ jedan drugome hermitski konjugirani i jednaki:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x + i\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}p\right)\ ,\ a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x - i\frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}p\right) \quad (14)$$

Za operatore definirane izrazima (14) vrijedi komutacijsko pravilo:

$$\left[a, a^\dagger\right] = 1 \quad (15)$$

Ovo je komutacijsko pravilo posljedica komutacijskoga pravila $[p, x] = -i\hbar$. Sada još moramo vidjeti kakva komutacija pravila vrijede za operator hamiltonijana H zadanoga jednadžbom (13). Tako imamo:

$$\left[a, aa^\dagger\right] = [a, a]a^\dagger + a\left[a, a^\dagger\right] = a\ ,\ \left[a, a^\dagger a\right] = \left[a, a^\dagger\right]a + a^\dagger[a, a] = a \quad (16)$$

Uvedimo operator $N = a^\dagger a$. Iskoristimo odnos $aa^\dagger = 1 + a^\dagger a = 1 + N$ i komutacijska pravila (15). Dobivamo:

Harmonički oscilator–algebarski način

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar\omega}{2}(2N+1) \\ \left[a, a^\dagger\right] &= 1 \\ [a, N] &= a \\ \left[a^\dagger, N\right] &= -a^\dagger \end{aligned} \tag{17}$$

Algebra triju opreatora a, $a^\dagger$ i N zatvorena je. To znači da komutacijsko pravilo između bilo koja dva od triju navedenih operatora daje opet jedan od triju operatora. Razumije se da jedinični operator 1 i nul-operator 0 na mijenjaju tu činjenicu, nego oni spadaju u istu algebru. Upravo zatvorenost algebre operatora omogućava da izračunamo vlastite vektore i vlastite vrijednosti hamiltonijana H, odnosno operatora N. Dakle, tražit ćemo vlastitu bazu operatora N, tj. vektore Ψ_n takve da vrijedi $N\Psi_n = n\Psi_n$. U tom postupku iskoristit ćemo komutacijska pravila (17).

Harmonički oscilator–algebarski način

Tako dobivamo:

$$[a, N]\,\Psi_n = an\Psi_n - Na\Psi_n = (n - N)\,a\Psi_n = a\Psi_n \Rightarrow N\,(a\Psi_n) = (n-1)\,(a\Psi_n) \tag{18}$$

Iz ovoga slijedi da je vektor $a\Psi_n$ također vlastiti vektor operatora N s vlastitom vrijednošću $n-1$. Mora, dakle, vrijediti $a\Psi_n = c_n\Psi_{n-1}$, gdje je c_n kompleksni broj. Na sličan način dobivamo $a^\dagger\Psi_n = d_n\Psi_{n+1}$, gdje je d_n također kompleksni broj. Konačno, pravilo $\left[a, a^\dagger\right] = 1$ daje nam odnos $c_{n+1}d_n - d_{n-1}c_n = 1$. No, mi tražimo ortonormiranu bazu, tj. takvu da vrijedi $(\Psi_n, \Psi_m) \equiv \Psi_n^* \cdot \Psi_m = \delta_{nm}$. Definicija hermitske konjugacije nam daje $(\Psi_n, a\Psi_{n+1}) = c_{n+1} = \left(a^\dagger\Psi_n, \Psi_{n+1}\right) = d_n^*$, tj. dobili smo odnos $c_{n+1} = d_n^*$. Iz tog odnosa i prije navedenoga odnosa, slijedi $|d_n|^2 - |d_{n-1}|^2 = 1$ i $|c_{n+1}|^2 - |c_n|^2 = 1$

Harmonički oscilator–algebarski način

No, vektori nastali djelovanjem operatora a, ili $a^\dagger$ na vektor Ψ_n moraju biti normalizabilni kao i sam vektor Ψ_n. Tako imamo
$(a\Psi_n, a\Psi_n) = |c_n|^2 = \left(a^\dagger a\Psi_n, \Psi_n\right) = (N\Psi_n, \Psi_n) = n\,(\Psi_n, \Psi_n) = n.$
Odavde slijedi $|c_n|^2 = n$. Uzastopnim djelovanjem operatora a na vektor Ψ_n, smanjivali bismo normu vektora sve dok ne bi ona postala negativnom. Međutim, stanja negativne norme nisu prihvatljiva. Što zaključujemo iz toga? Budući da operator a smanjuje vlastitu vrijednost točno za 1, slijedi da uzastopnim djelovanjem toga operatora moramo doći do stanja čija je norma jednaka 0, tj. do vektora kojega operator a poništava. Dakle, mora postojati stanje s vlastitom vrijednošću $n = 0$ za koje vrijedi $a\Psi_0 = 0$. Iz toga slijedi da n mora biti prirodan broj. Dakle, hamiltonijan H ima vlastite vrijednosti $E_n = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$.

Zadatci

1. Izračunajte prva tri Hermiteova polinoma i normirajte pripadajuće valne funkcije harmoničkoga oscilatora.
2. Izračunajte umnožak neodređenosti $\Delta x \Delta p$ za osnovno stanje harmoničkoga oscilatora.
3. Pokažite da vrijedi $a^\dagger \Psi_n = \sqrt{n+1}\Psi_{n+1}$ i da operator $a^\dagger$ ne može imati vlastite vektore.
4. Iskoristivši definiciju operatora a s pomoću operatora položaja i količine gibanja, izračunajte valnu funkciju osnovnog stanja harmoničkoga oscilatora i uvjerite se da je ona ista kao i valna funkcija koja se dobije rješavanje Schrödingerove jednadžbe u obliku diferencijalne jednadžbe drugoga reda.