אוסצילטור הרמוני (1D)

קלאסי

הדוגמא הפשוטה ביותר עבור אוסצילטור הרמוני קלאסי הינה מסה הקשורה לקפיץ המקובע לקיר:

בהנחה שאורך שיווי המשקל של הקפיץ הינו x_0, קבוע הקפיץ הינו k ומסת הגוף m משוואות ניוטון עבור המערכת תהיה

$$F=-kx=m\ddot{x}$$ x - התארכות הקפיץ.

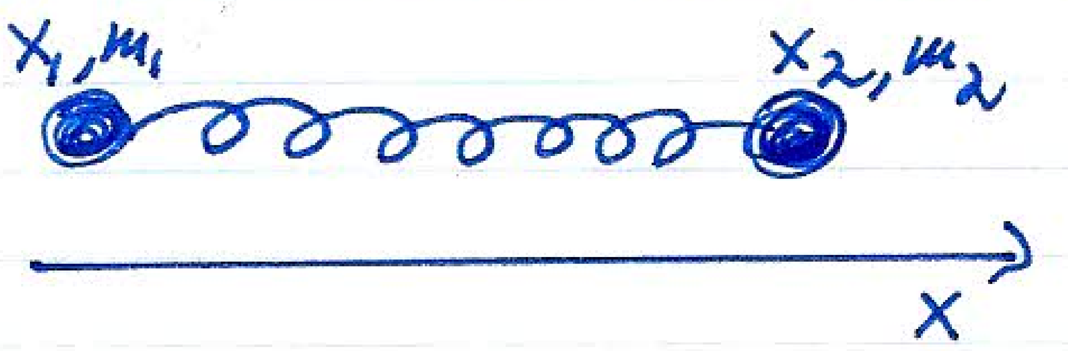
אשר פתרונה נתון ע"י $x(t)=A\sin(\omega t)+B\cos(\omega t)$

כאשר $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$ והקבועים A, B נקבעים מתנאי ההתחלה: $A=v_0/\omega$

$B=x_0$

$$\begin{cases} x(t=0)=A\sin(\omega\cdot 0)+B\cos(\omega\cdot 0)=B=x_0 \\ v(t=0)=\omega A\cos(\omega\cdot 0)-\omega B\sin(\omega\cdot 0)=\omega A=v_0 \Rightarrow A=v_0/\omega \end{cases}$$

אם נהיה מעוניינים בתאור הבעיה בה שתי מסות מחוברות ביניהן בקפיץ



הסיבה לכך היא שמודל זה משמש לתאור התנודות המולקולריות בין אטומים שונים במולקולה הקשורים בקשר כימי אשר יקורב כבור הרמוני.

הסיבה לכך שנצטרך לתאר את הבעיה באופן קוונטי ולא קלאסי היא שהמסות קטנות מאוד ולפיכך אורך גל דה-ברולי יהיה מסדר גודל של המרחק בין האטומים.

אך בטרם נפנה לפתרון הבעיה הקוונטית נראה כיצד מטפלים בבעיה הקלאסית.

- הערה: המערכת שתוארה לעיל בה המסה מחוברת לקפיץ מקובע יכולה לתאר את התנודות של חלקיק ספוח למשטח (קליטה כימית).

משוואות ניוטון עבור המקרה הנ"ל הינן:

$$\begin{cases} F_1=m_1\ddot{x}_1=k\left[(x_2-x_1)-x_0\right] \\ F_2=m_2\ddot{x}_2=-k\left[(x_2-x_1)-x_0\right] \end{cases}$$

בידקו סימנים!

ניתן לפשט בעיה כזו ע"י מעבר למערכת קואורדינטות חדשה

בה: הקואורדינטה היחסית

קואורדינטת מרכז המסה.

$$\begin{cases} x = x_2 - x_1 \\ X = \dfrac{m_1x_1+m_2x_2}{m_1+m_2} \end{cases}$$

נרשום את משוואות התנועה עבור משתנים אלו:

$$\ddot{x} = \ddot{x}_2 - \ddot{x}_1 = -\frac{k}{m_2}\left[(x_2-x_1)-x_0\right] - \frac{k}{m_1}\left[(x_2-x_1)-x_0\right] =$$

$$= -\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)k(x-x_0)$$

$$\Rightarrow \underbrace{\left(\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}\right)}_{\mu}\ddot{x} = -k(x-x_0) \Rightarrow \boxed{\mu\ddot{x} = -k(x-x_0)}$$

$$\ddot{X} = \underbrace{\left(\frac{1}{m_1+m_2}\right)}_{\frac{1}{M}}\underbrace{\left[k(x-x_0)-k(x-x_0)\right]}_{0} = 0 \quad ; M = m_1+m_2$$

$$\Rightarrow M\ddot{X} = 0 \Rightarrow \boxed{X_{c.m.}(t) = x_0 + v_{c.m.}t}$$

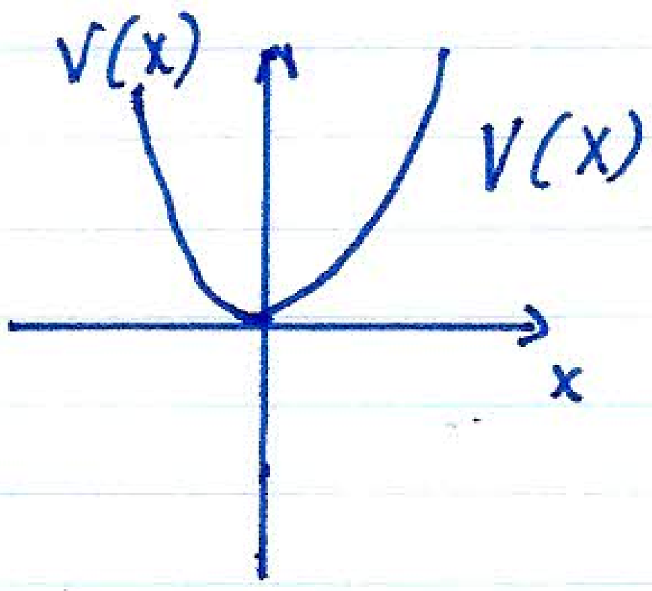
במערכת הקואורדינטות החדשה מרכז המסה נע כחלקיק חופשי בעל מסה $M=m_1+m_2$ בעוד שהקואורדינטה היחסית מתנהגת כגוף בעל מסה $\mu=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$ המחובר לקפיץ מקובע בעל קבוע קפיץ k ואורך מנוחה x_0.

כאשר $m_2\to\infty$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2} \xrightarrow{m_2\to\infty} \frac{1}{m_1}$$

כלומר $\mu=m_1$ ונחזור לבעיה הראשונה של גוף בעל מסה m_1 מחובר לקפיץ מקובע.

בהתאם לטיפול הקוונטי בבעיה. טיפול זה יעסוק בהמשך מתאים מורכב יותר ממה שהתרגלנו בו עד כה אך בסופו נבין את התנודות הקוונטיות של ובתנודות מולקולריות ונגלה תופעה קוונטית חדשה שלא נתקלנו בה עד כה - תופעת המנהור.



$V(x)=\frac{1}{2}kx^2$

קוונטי :

ראשית נרשום את ההמילטוניאן.
לשם כך נזכיר את הפוטנציאל:

האנרגיה המינימאלית שאותה ניתן לתת לחלקיק קלאסי בפוטנציאל הנ"ל תהייה 0 - החלקיק יהיה במנוחה בתחתית הבור. כפי שכבר ראינו בבעיה של חלקיק בקופסא חד-ממדית עבור חלקיק קוונטי תהייה אנרגיית אפס שתהיה גבוהה מאפס. אם ניתן לחלקיק הקלאסי אנרגיה E - כללית הוא יבצע תנודות הרמוניות מצד לצד בבור הפוטנציאל.

ההמילטוניאן של המערכת יהיה:

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}k\hat{x}^2=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\hat{x}^2$$

כעת ניתן לרשום את משוואת שרדינגר ולקבל את אוסף האנרגיות והפונקציות העצמיות של המערכת.

100 ס"מ$^{-1}$ - 4000 ס"מ$^{-1}$

מיים 4400 ס"מ$^{-1}$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\Psi(x)}{\partial x^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2x^2\Psi(x)=E\Psi(x)$$

$kT\approx208$ ס"מ$^{-1}$

- תנאי השפה הינו $\Psi(x\to\pm\infty)=0$ בכדי שהפונקציה תהיה בת-נירמול.

$T=300K$.

זו משוואה דיפרנציאלית מסדר שני עם מקדמים לא קבועים שאותה נצטרך לפתור. נראה מפורשות את הפתרון ונבחן מהיכן מגיעה הקוונטיזציה.

בכדי להקל על הפתרון נגדיר ~~[illegible]~~ קבוע
$$\alpha\equiv\left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)$$

ומשתנה חדש :
$$y=\alpha^{1/2}x$$

נציב במשוואה ונקבל:

$$\frac{\partial}{\partial x}=\alpha^{1/2}\frac{\partial}{\partial y}\Rightarrow\frac{\partial^2}{\partial x^2}=\alpha\frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\alpha\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\frac{1}{2}\mu\omega^2\frac{y^2}{\alpha}\Psi=E\Psi\quad/\cdot\left(-\frac{2\mu}{\hbar^2\alpha}\right)$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+\left(\frac{2\mu E}{\hbar^2\alpha}-\frac{\mu^2\omega^2}{\hbar^2\alpha^2}y^2\right)\Psi=0\quad;\quad\boxed{\lambda\equiv\frac{2\mu E}{\hbar^2\alpha}=\frac{2E}{\hbar\omega}}$$

1"

$$\boxed{\frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2}+(\lambda-y^2)\Psi=0}$$

ניקינו את המשוואה מכל הקבועים הפיזיקליים ונשארנו עם קבוע יחיד λ חסר יחידות. אולם לא הורדנו מדרגת הקושי של המשוואה. היא עדיין משוואה מסדר שני עם מקדמים לא קבועים.

תנאי השפה כעת הם $\Psi(y\to\pm\infty)=0$

בשלב הראשון ננסה ללמוד על הפתרון בגבול בו $y\to\infty$ - **הגבול האסימפטוטי!**

בגבול זה $y^2\gg\lambda$ ולכן המשוואה תהיה מהצורה:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=y^2\psi$$

ננחש למשוואה פתרון מהצורה $\psi=e^{-\frac12 y^2}$ ונציב:

(למעשה $\psi(x)=y^n e^{-\frac12 y^2}$ הוא פתרון אסימפטוטי לכל n.)

$$\frac{\partial\psi}{\partial y}=-y\,e^{-\frac12 y^2}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=-e^{-\frac12 y^2}+y^2e^{-\frac12 y^2}\underset{\text{בגבול האסימפטוטי}}{\approx}y^2e^{-\frac12 y^2}$$

נציב זאת במשוואה ונקבל:

$$y^2e^{-\frac12 y^2}=y^2e^{-\frac12 y^2}\ \checkmark$$

כלומר בגבול בו $y\to\infty$ הפתרון שמצאנו מקיים את המשוואה.

גם פתרון מהצורה $e^{\frac12 y^2}$ הוא פתרון המקיים את המשוואה בגבול הזה.

אך לא נתייחס בפתרון זה כיוון שהוא אינו פיזיקלי - בלתי ניתן לנרמול.

כלומר הפתרון האסימפטוטי הוא $\psi(y)=e^{-\frac12 y^2}$ כאשר $y\to\infty$.

למשוואה מסדר שני יש שני פתרונות.

כעת נוכל לרשום את הפתרון הכללי למשוואה באופן הבא:

$$\psi(y)=H(y)e^{-\frac12 y^2}$$

כאשר $H(y)\xrightarrow[\cancel{y\to\infty}]{}const$ כך שבגבול האסימפטוטי נקבל בחזרה את הגאוסיאן.

כעת נציב פתרון זה במשוואת שרדינגר ונקבל משוואה חדשה עבור $H(y)$ משוואה זו תהיה משמעותית וגם פשוטה מהמשוואה המקורית.

$$\psi'(y)=H'(y)e^{-\frac12 y^2}-y\,H(y)e^{-\frac12 y^2}=\left[H'(y)-yH(y)\right]e^{-\frac12 y^2}$$

$$\cancel{\psi''(y)=H''(y)-yH'(y)e^{-\frac12 y^2}}$$

$$\psi''(y)=\left[H''(y)-H(y)-yH'(y)\right]e^{-\frac12 y^2}+\left[H'(y)-yH(y)\right](-y)e^{-\frac12 y^2}=$$

$$=\left[H''(y)-H(y)-yH'(y)-yH'(y)+y^2H(y)\right]e^{-\frac12 y^2}=$$

$$=\left[H''(y)-2yH'(y)+(y^2-1)H(y)\right]e^{-\frac12 y^2}$$

ולכן:

$$\left[H''(y)-2yH'(y)+(y^2-1)H(y)\right]\cancel{e^{-\frac{1}{2}y^2}}+(\lambda-y^2)H(y)\cancel{e^{-\frac{1}{2}y^2}}=0$$

$$\Rightarrow \boxed{H''(y)-2yH'(y)+(\lambda-1)H(y)=0}$$

משוואה זו נקראת משוואת הרמיט Hermite.

משוואה זו עדיין משוואה מסדר שני עם מקדמים לא קבועים אך במקום y^2 מופיע y. בנוסף עקב הסימטריה של המשוואה קיים קשר בין H'' ל- $H'y$ ול- H שמאפשר לפתור את המשוואה בקלות.

נכתוב בעזרת פיתוח משוואה דיפרנציאלית משוט זה. לצורך כך נכתוב את הפונקציה $H(y)$ כטור:

$$H(y)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n y^n$$

כאשר המשוואה שנוצרת לפנינו היא מציאת מקדמי הטור.

הערה: אם נתבונן במשוואה הבאה $f''+a^2f=0$

פתרונותיה יהיו $\sin(x)$ ו- $\cos(x)$. כעקרון ניתן להציב פתרון בצורת טור עבור $f(x)$ ומקדמי הטור יתנו את טור טיילור של כ"א $\sin(x)$ ו- $\cos(x)$.

הערה: יכולנו להשתמש בשיטת הטור גם עבור המשוואה המקורית

$$\Psi''+(\lambda-y^2)\Psi=0$$

אולם אז המשוואה עבור מקדמי הטור הייתה סבוכה מאוד.

המקדמים של פיתוח הטור יתקבלו מתוך הצבת הטור במשוואת הרמיט: ראשית נחשב את הנגזרות:

$$H(y)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n y^n$$

$$H'(y)=\sum_{n=1}^{\infty}a_n n y^{n-1}=\sum_{n=0}^{\infty}a_n n y^{n-1}$$

האיבר של $n=0$ מתאפס.

$$H''(y)=\sum_{n=2}^{\infty}a_n n(n-1)y^{n-2}=\sum_{m=0}^{\infty}a_{m+2}(m+2)(m+1)y^m=$$

נגדיר $m=n-2$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}a_{n+2}(n+2)(n+1)y^n$$

וכעת נציב:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_{n+2}(n+2)(n+1)y^n - 2\sum_{n=0}^{\infty} a_n \cdot n \cdot y^n + (\lambda-1)\sum_{n=0}^{\infty} a_n y^n = 0$$

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

כל מקדם בטור מכפיל y^n - כל תוצאה היא בלתי תלויה ועל כן בכדי שהטור יתאפס זהותית לכל y נדרש כי המקדמים של כל חזקה יתאפסו בנפרד. לדוגמא עבור $n=0$ $y^0=1$ הוא קבוע ומקדמו חייב להתאפס בכדי שהטור יתאפס לכל y.

מכאן שניתן לרשום נוסחאת רקורסיה של מקדמי הטור:

$$\boxed{a_{n+2} = \frac{2n+1-\lambda}{(n+1)(n+2)}\, a_n \quad ; \; n=0,1,2,\ldots}$$

בהצבת הטור במשוואה הדיפרנציאלית עברנו ממשוואה דיפרנציאלית למשוואה עבור מקדמי הטור.

בכדי לקבוע את מקדמי הטור עלינו לקבוע את a_0 ואת a_1. מתוך ידיעת a_0 ניתן לקבל בעזרת כלל הרקורסיה את כל המקדמים הזוגיים: $a_2, a_4, \ldots$

ומתוך ידיעת a_1 ניתן לקבוע, ע"י כלל הרקורסיה, את כל המקדמים האי-זוגיים: $a_3, a_5, \ldots$

a_0 ו- a_1 ייקבעו מתוך תנאי השפה.

נשים לב כי אם אחד המקדמים a_j מתאפס אזי כל המקדמים $a_{j+2}, a_{j+4}, \ldots$ יתאפסו גם הם!

קיבלנו למעשה הפרדה של מקדמים זוגיים ואי-זוגיים וניתן לכן לבנות לבעיה פתרונות בעלי זוגיות מוגדרת (פתרונות זוגיים עבורם $a_1=a_3=a_5=\ldots=0$ ופתרונות אי-זוגיים עבורם $a_0=a_2=a_4=\ldots=0$). דבר זה נובע מהעובדה שמשוואת הרמיט הינה אינווריאנטית לטרנספורמציית שיקוף $y\to -y$ ולמעשה כתוצאה מכך שמשוואת שרדינגר עבור אוסצילטור הרמוני הינה אינווריאנטית לטרנספורמציה $x\to -x$.

הסימטריה הנ"ל סביב השיקוף מבטיחה שניתן לבנות פתרונות עם זוגיות מוגדרת.

כעת עלינו לכפות את תנאי השפה בכדי לקבוע את a_0 ואת a_1, אך בטרם נעשה זאת נבחן כיצד הטור מתנהג בגבול האסימפטוטי בו $y\to\pm\infty$. אם הטור יתבדר מהר יותר מ- $e^{y^2/2}$ אזי הפתרון כולו ילך לאינסוף בגבול האסימפטוטי שמצאנו בבעיה.

בכדי לבחון כיצד מתנהג הטור בגבול $y\to\pm\infty$ נתבונן על היחס בין המקדמים העוקבים בגבול הזה: כאשר $y\to\pm\infty$ התרומות הדומיננטיות בטור יהיו אלה עם $n\to\infty$ ולכן נתבונן ביחס:

$$\frac{a_{n+2}}{a_n}=\frac{2n+1-\lambda}{(n+1)(n+2)}\xrightarrow[n\to\infty]{}\frac{2}{n}$$

נשווה זאת כעת להתנהגות של הפונקציה הבאה:

$$\underbrace{e^{y^2}}_{\text{טור טיילור}}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(y^2)^n=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}y^{2n}\underset{2n=m}{=}\sum_{\substack{m=0\\ m\ \text{זוגי}}}^{\infty}\frac{1}{\left(\frac{m}{2}\right)!}y^m=\sum_{\substack{m=0\\ m\ \text{זוגי}}}^{\infty}b_m y^m\ ;\ b_m=\frac{1}{\left(\frac{m}{2}\right)!}$$

באותו צורה ניתן להראות עבור הפתרון האי-זוגי ע"י השוואה ל- ye^{y^2} במקום e^{y^2}.

נבחן את היחס בין המקדמים העוקבים בטור הזה:

$$\frac{b_{m+2}}{b_m}=\frac{\frac{1}{[(m+2)/2]!}}{\frac{1}{(m/2)!}}=\frac{\left(\frac{m}{2}\right)!}{\left(\frac{m}{2}+1\right)!}=\frac{1}{\frac{m}{2}+1}\xrightarrow[m\to\infty]{}\frac{2}{m}$$

כלומר בגבול ש-$y\to\infty$ הטור שקיבלנו עבור $\underset{\text{הזוגי}}{H(y)}$ מתנהג כמו e^{y^2}:

$$H(y)\underset{y\to\infty}{\sim}e^{y^2}$$

כעת בעיה קשה שכן אם נציב זאת בפתרון הכללי נקבל:

$$\Psi(y)=H(y)e^{-y^2/2}\underset{y\to\infty}{\sim}e^{y^2}e^{-y^2/2}=e^{y^2/2}\xrightarrow[y\to\infty]{}\infty$$

כלומר בגבול האסימפטוטי <u>הפתרון מתבדר ואינו ניתן לנרמול</u>. תנאי השפה לא מתקיימים.

מכיוון שהטור <u>האינסופי</u> שקיבלנו <u>לא יכול</u> לקיים את <u>תנאי השפה</u>. הפתרון לבעיה זו הוא שהטור לא יכול להיות אינסופי כלומר הטור חייב להיות <u>סופי</u>. בטור סופי לא יהיו איברים שקיימים $n\to\infty$ ולכן לא נקבל את ההתנהגות של e^{y^2} כאשר $y\to\infty$.

כאשר הטור סופי תנאי השפה מתקיימים והפונקציה כעת ניתנת לנרמול.

כלומר הטור שנדרש יהיה מהצורה: $H_N(y)=\sum_{n=0}^{N}a_n y^n$

כאשר N מספר שלם סופי ומקדמי הטור עדיין חייבים לקיים את תנאי הרקורסיה.

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

בכדי שתנאי השפה יתקיימו, הטור חייב להיות סופי ולכן עלינו למצוא מקדם $a_{N+2}=0$ כאשר $a_N\neq 0$. כל המקדמים הגדולים מ-$N+2$: $a_{N+2}, a_{N+4}, \dots$ יתאפסו מתוך כלל הרקורסיה. כמובן אם $N+2$ זוגי אז נהיה חייבים לאפס את כל הטור האי-זוגי כך ש $a_1=0$ (בכדי לקבל טור סופי) ואם $N+2$ אי-זוגי אז נצטרך לאפס את הטור הזוגי בכדי לקבל טור סופי ולכן $a_0=0$. לא ניתן לאפס a_{N+2} זוגי ואי זוגי בו-זמנית. כעת בכדי ש $a_{N+2}=0$ יתאפס נדרוש כי $2N+1-\lambda=0$ וכיוון ש $\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}$ נקבל כי: $2E/\hbar\omega=2N+1$

כלומר:

$$\boxed{E_N=\hbar\omega\left(N+\tfrac{1}{2}\right)\ ;\ N=0,1,2,3,\dots}$$

רמות האנרגיה של האוסצילטור ההרמוני - הע"ע של ההמילטוניאן, המתקבל מתנאי השפה.

מכאן נובעת הקוונטיזציה של האנרגיה. רק עבור N שמקיימים את
המשוואה הזו מתקבל טור סופי שמקיים את תנאי השפה ומאפשר נירמול
הפונקציה.
עלינו לזכור כי כלל הרקורסיה מקשר בין a_N לבין a_{N+2}. לכן אם
אנו דורשים התאפסות של אחד המקדמים הזוגיים לדוגמא a_8 -
אנו חייבים לדרוש כי המקדם האי-זוגי הראשון יתאפס גם הוא $a_1=0$
אחרת הטור האי-זוגי לא יתאפס (ההתאפסות קורית בטור הזוגי) והפתרון
יתבדר ולא יקיים את תנאי השפה. באופן דומה אם אנו מאפסים
את אחד המקדמים האי-זוגיים a_7 לדוגמא אזי חייב להתקיים כי $a_0=0$
אחרת הטור הזוגי לא יתאפס והפתרון המלא יתבדר ולא יקיים את
תנאי השפה.

<u>נבחן מספר דוגמאות:</u>

כדי שגם הטור האי-זוגי יתאפס.

* נבחר <u>$N=0$</u> כך ש $a_2=0$ ונדרוש גם כי $a_1=0$ במקרה זה

אנרגיית האפס.

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\Psi_0(y) = H_0(y)e^{-\frac{1}{2}y^2} = a_0 e^{-\frac{1}{2}y^2}$$ a_0 נקבע מתנאי הנרמול.

* נדרוש כי $a_3=0$ ולכן <u>$N=1$</u> במקרה זה עלינו לדרוש כי $a_0=0$ בכדי שפו' תהיה ברת נירמול נקבל כי:

$$E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$\Psi_1(y) = H_1(y)e^{-\frac{1}{2}y^2} = a_1 y e^{-\frac{1}{2}y^2}$$ פו' זו נוטה ל-0 באינסוף

a_1 - נקבע מתנאי הנורמול

* עבור <u>$N=2$</u> $a_4=0$ ואנו חייבים לדרוש כי $a_1=0$ ולכן:

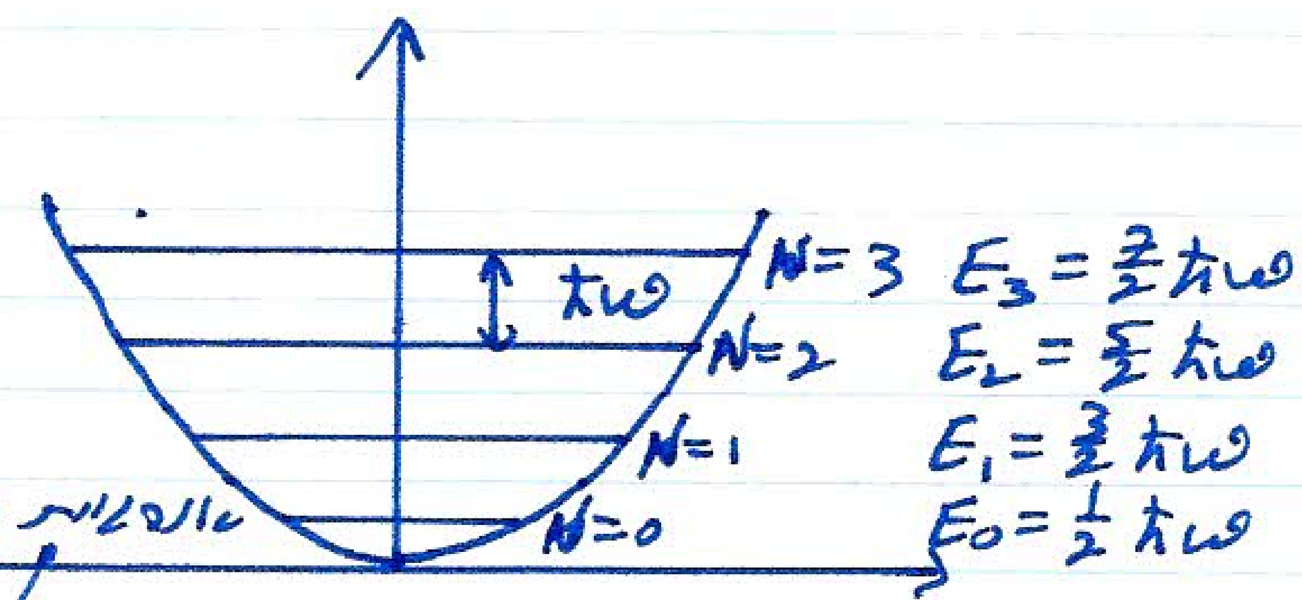
$$E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

$$\Psi_2(y) = H_2(y)e^{-\frac{1}{2}y^2} = (a_0 + a_2 y^2)e^{-\frac{1}{2}y^2} = a_0\left[1 + y^2\left(\frac{1-\lambda}{2}\right)\right]e^{-\frac{1}{2}y^2}$$

$$a_2 = \left(\frac{1-\lambda}{2}\right)a_0$$ a_0 - נקבע מתנאי הנורמול.

תנאי הרקורסיה

נזכיר את תוצאות הרמונית:



$$\begin{cases} E_N=\left(N+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \\ \Delta E_N=E_{N+1}-E_N=\left(N+\frac{3}{2}\right)\hbar\omega-\left(N+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega=\hbar\omega \end{cases}$$

המרווחים בין רמות האנרגיה קבועים!

בשונה מהמקרה המרווחים הדומים עם n ובחלקיק בקופסה שם התרחבו עם n.

עקרון אי הוודאות מחייב כי אנרגיית האפס תהיה סופית. בחלקיק בקופסה אנרגיית האפס הייתה אפס אך החלקיק היה מרוח על כל הקופסה בהסתברות שווה.

ניתן כעת לרשום את הפתרון הכללי עבור האוסצילטור ההרמוני:

$$E_N=\left(N+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega\ ;\ N=0,1,2,\dots$$

$y=\alpha^{1/2}x$; פולינומי הרמיט.

$$\Psi_N(x)=N_N\,H_N\!\left(\alpha^{1/2}x\right)e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}\ ;\ \alpha=\frac{\mu\omega}{\hbar}$$

מקדם נרמול

$$N_N=\left(\frac{1}{2^N N!}\right)^{1/2}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4}$$

מתקבל מתוך $\int_{-\infty}^{\infty}\Psi_N^*(x)\Psi_N(x)dx=1$

חשוב: * התוצאה שהמרווחים קבועים ויש אינסוף רמות אנרגטיות אינו פיזיקלי כאשר מתבוננים בתנודות שכן הרישום מתפרקים בתנודות גבוהות בתוך שמשל

פוטנציאל סופי!

נרשום מספר דוגמאות עבור פולינומי הרמיט:

$$H_0(y)=1\ ;\ H_1(y)=2y\ ;\ H_2(y)=4y^2-2\ ;\ H_3(y)=8y^3-12y$$

נהוג לקבוע את המקדם של החזקה הגבוהה ביותר כ- 2^N. ואז את כל המקדמים מקבלים מהרקורסיה בהמשך.

כאשר המקדם מתקבל מתוך כלל הרקורסיה. לדוגמא עבור $H_3(y)$:

מתקיים: $\lambda=2N+1=2\cdot3+1=7$, $a_1=-12$, $a_0=0$.

מכאן ניתן לחשב את a_3:

$$a_3=\frac{2\cdot1+1-7}{(1+1)(1+2)}(-12)=\frac{(-4)}{6}\cdot(-12)=8$$

ויתר המקדמים מתאפסים: $a_2=a_4=\dots=0$; $a_5=a_7=\dots=0$.

~~נרשום מספר תכונות של פולינומי הרמיט:~~

~~1. כתוצאה מהרקורסיה בין המקדמים מתקיים יחס רקורסיה גם בין הפולינומים עצמם:~~

$$\cancel{y\,H_n(y)=n\,H_{n-1}(y)+\frac{1}{2}H_{n+1}(y)}$$

~~כך שמתוך ידיעת $H_1(y)$ ו- $H_0(y)$ ניתן לקבל את יתר הפולינומים.~~

~~מקיימים את המשוואה:~~

$\cancel{H_n''(y)-2y\,H_n'(y)+2n\,H_n(y)=0}$

נציין מספר תכונות של פולינומי הרמיט:

בתנאי שבחרנו את המקדם הגבוה ביותר כ-2^N.

1) כתוצאה מהרקורסיה בין המקדמים מתקיים יחס רקורסיה גם בין הפולינומים עצמם:

$$y H_N(y) = N H_{N-1}(y) + \frac{1}{2} H_{N+1}(y)$$

כך שמתוך ידיעת $H_0(y)$ ו-$H_1(y)$ ניתן לקבל את יתר הפולינומים.

2) הפולינומים מקיימים את המשוואה הדיפרנציאלית הבאה (משוואת הרמיט):

$$H_N''(y) - 2y H_N'(y) + 2N H_N(y) = 0$$

כאשר השתמשנו בעובדה שמתקיים $\lambda = 2N+1$.

3) הפולינומים ניתנים לכתיבה כטור:

$$H_N(y) = \sum_{n=0}^{N} a_n y^n$$

כאשר מקדמי הטור מקיימים את יחס הרקורסיה הבא:

$$a_{n+2} = \left[\frac{2n-2N}{(n+1)(n+2)}\right] a_n$$

4) <u>פונקציה יוצרת</u>

ניתן לקבל את הפולינומים מתוך הנוסחה הבאה:

$$H_N(y) = (-1)^N e^{y^2} \frac{d^N}{dy^N} e^{-y^2}$$

כך ש-e^{-y^2} היא הפונקציה היוצרת של הפולינומים.

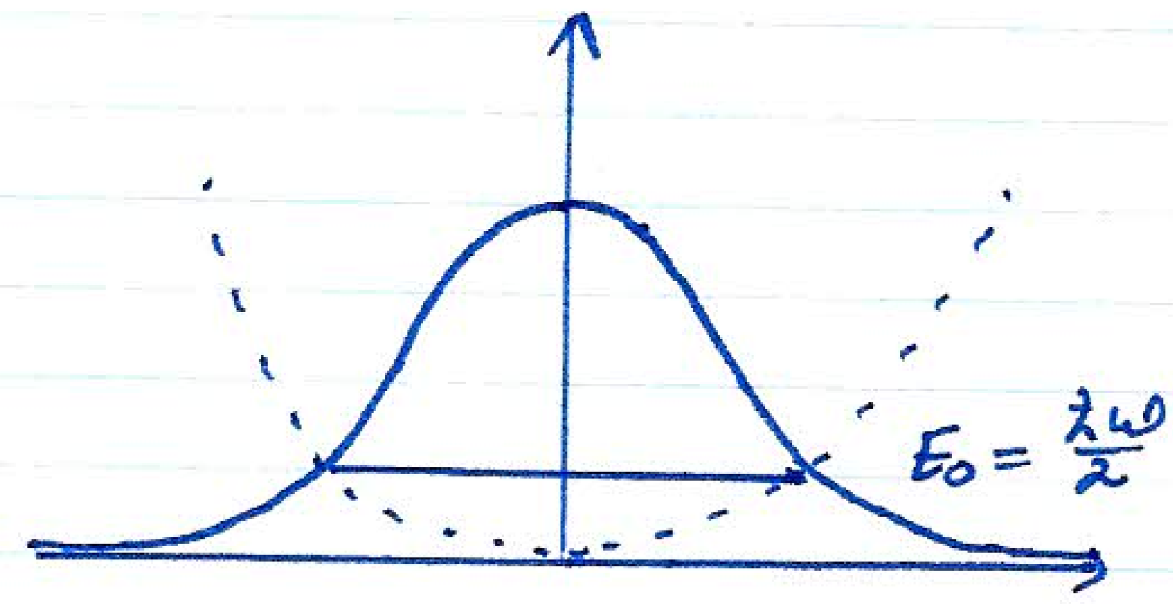
5) מתקיים הקשר הבא:

$$\frac{d H_N(y)}{dy} = 2N H_{N-1}(y)$$

מכל הכללים הללו ניתן לבנות את הפולינומים ואף לחשב באופן פשוט יחסי אורתוגונליות בין פולינומים שונים ויחסי אורתונורמליות.

לא נציג תכונות אלו אך ננצל אותם בהמשך החישובים.

ניתן כעת לצייר את פונקציות הגל:



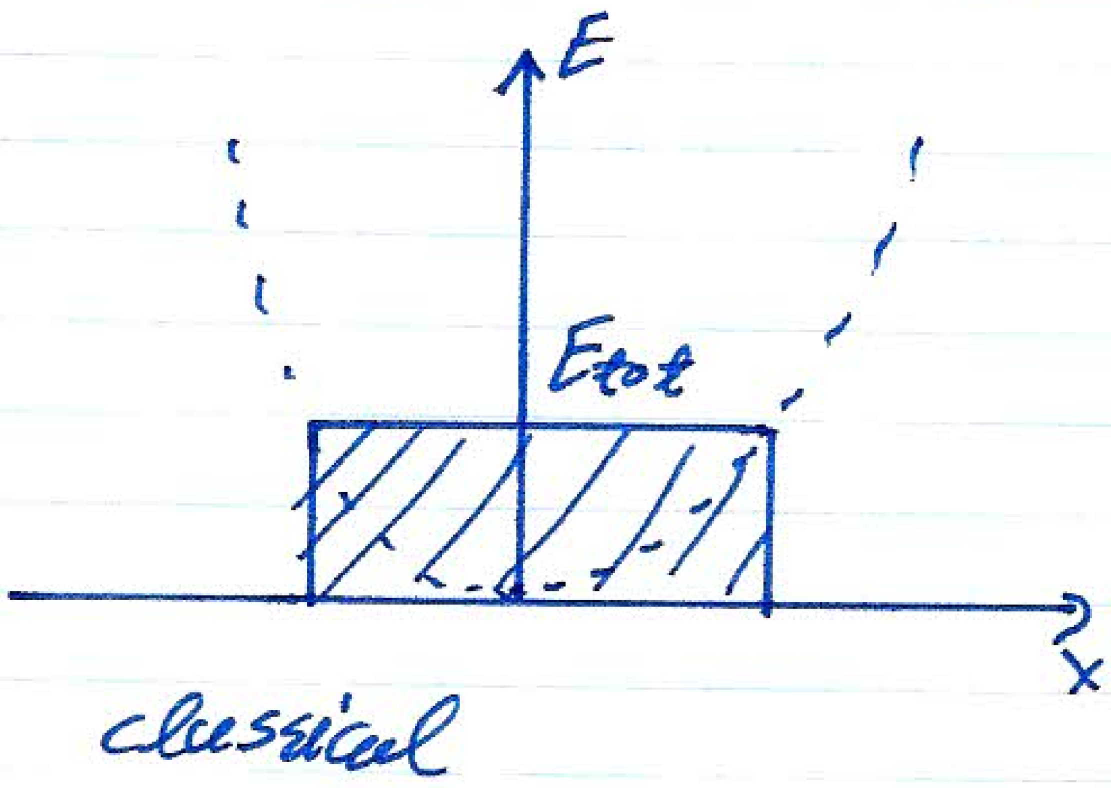
עבור $n=0$ נקבל:

$$\psi_0(x)=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\alpha x^2/2}$$

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$$

אנו מגלים תופעה קוונטית חדשה בה לא נתקלנו במצבים קודם עסקנו עד כה. תופעת ~~המינהור~~ (Tunneling).

עבור חלקיק קלאסי קיים תחום במרחב בו הוא יכול להמצא. התחום הזה נקבע מתוך האנרגיה הכללית שלו:



נקודות התפנית הקלאסיות הן הנקודות בהן מתאפסת מהירות החלקיק ושם כל האנרגיה הוא פוטנציאלית.

באופן כללי מתוך שימור האנרגיה מתקיים כי: $E^{cl}_{tot}=T^{cl}+V^{cl}$

ולכן עבור נקודות התפנית הקלאסיות מתקיים:

classical

$$E^{cl}_{tot}=V^{cl}_{*}=\frac{1}{2}m\omega^2 x_*^2$$

ולכן נקודות התפנית הקלאסיות נתונות ע"י הביטוי:

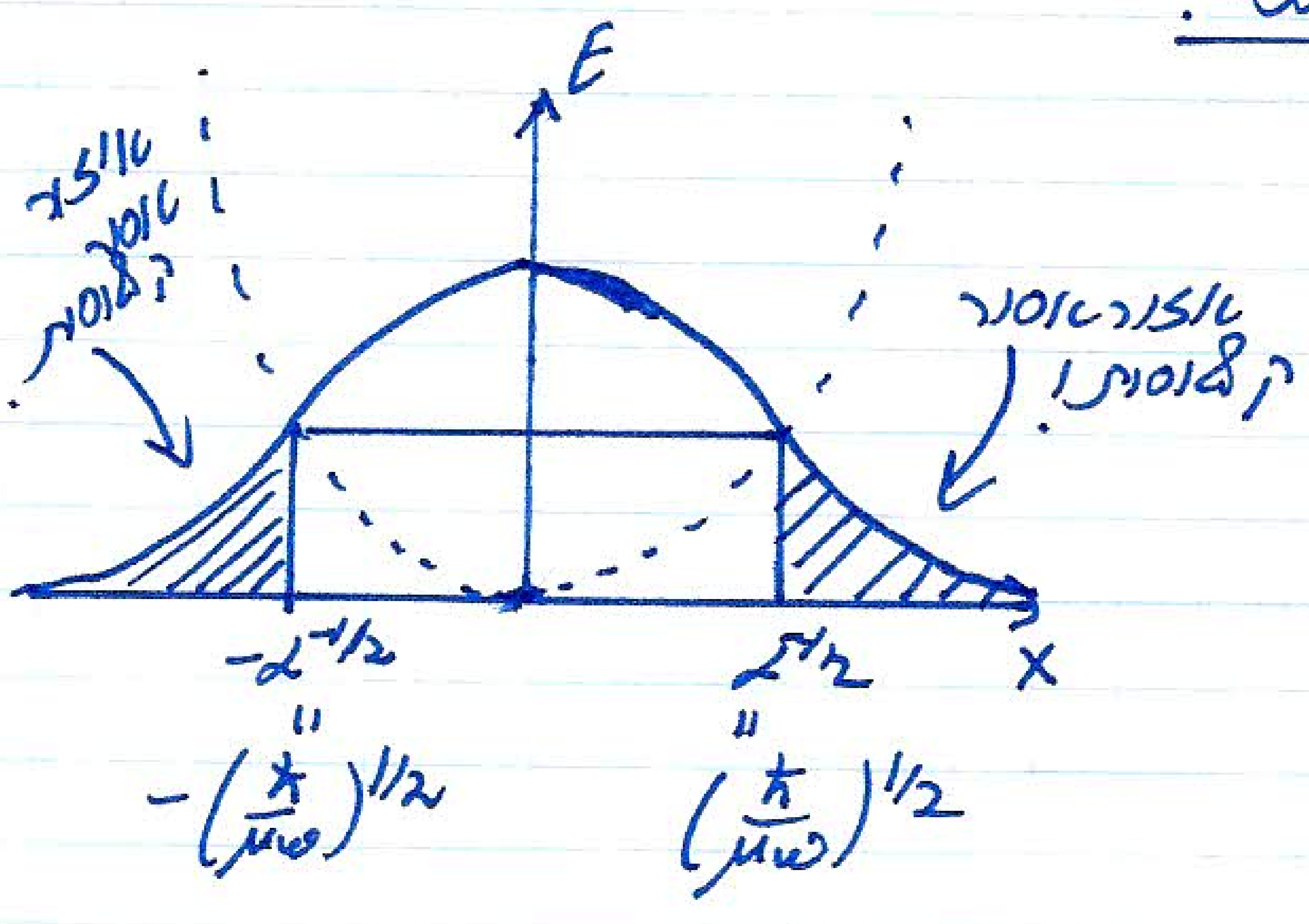
$$x_*=\pm\sqrt{\frac{2E^{cl}_{tot}}{m\omega^2}}$$

turning point

החלקיק הקלאסי, בהינתן האנרגיה שלו, לא יכול לצאת אל מעבר לנקודות הללו - אין לו מספיק אנרגיה להתגברות.

לכן ההסתברות למצוא את החלקיק הקלאסי במקום $x>x_*$ היא אפס.

כעת נבחן מה קורה עבור <u>חלקיק קוונטי.</u>



עבור $n=0$ האנרגיה הכללית הינה $E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega$ ולכן נקודות התפנית הקלאסיות נתונות ע"י $\pm\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{1/2}=\pm\alpha^{-1/2}$.

ניתן לראות כי עבור חלקיק קוונטי קיים סיכוי למצוא את החלקיק באזור האסור קלאסית!

לא ראינו את התופעה הזו במקרה של חלקיק בקופסא שכן הפוטנציאל הלך לאינסוף. בקופסא סופית החלקיק כן יכול לצאת מגבולות הקופסא.

בשנת 1986 קיבלו Rohrer & Binnig פרס נובל על המצאת ה- S.T.M.

Scanning Tunnelling Microscope שמאפשר סריקה ואפיון של משטחים ע"י זרם מנהור הנוצר בין המשטח והטיפ. לאלקטרונים אין מספיק אנרגיה לעבור מהטיפ למשטח באופן קלאסי אך עקב תופעת המנהור הם יכולים לעבור.

תופעה זו גם חשובה בתהליכים ביולוגיים בהם לעיתים מעברי פרוטונים נשלטים ומתאפשרים בזכות אפקט המנהור. כמובן באלקטרוניקה מולקולרית לתופעת המנהור תפקיד חשוב, וכן בעת אגירת מימן לצורכי אנרגיה.

- בכדי להעריך מה הסיכוי למציאת החלקיק באזור האסור קלאסית עלינו לחשב את האינטגרל הבא:

$$\int_{-\infty}^{-\alpha^{-1/2}} |\psi_n(x)|^2 dx + \int_{\alpha^{-1/2}}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx \quad ; \quad n=0,\ \alpha=\frac{\omega m}{\hbar}$$

- נחשב מהו צפיפות ההסתברות למציאת החלקיק בנקודת התפנית הקלאסית:

$$|\psi_0^*(x_t)|^2 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\alpha\cdot(\alpha^{-1/2})^2} = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} e^{-1} \sim \frac{1}{3}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}$$

- צפיפות ההסתברות המקסימלית נתונה ע"י:

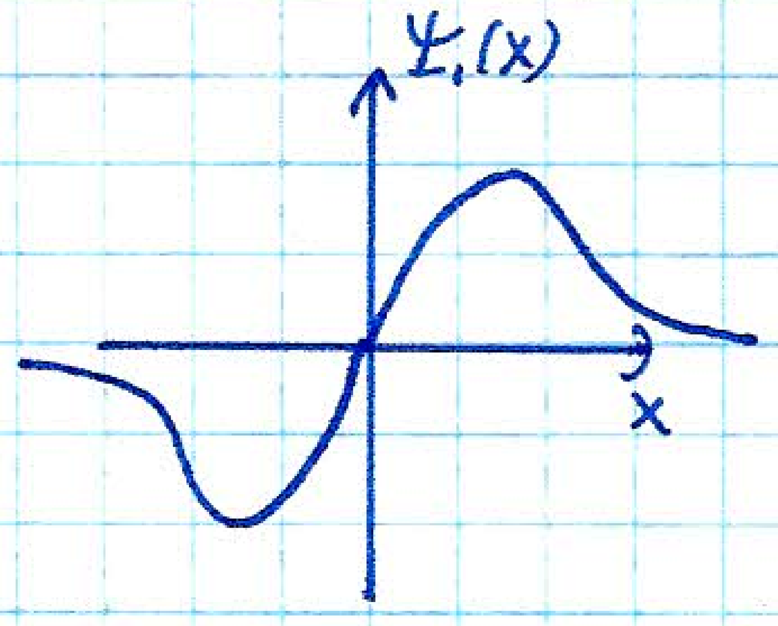
$$|\psi_0(0)|^2 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \cdot e^0 = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}$$

כך שהסיכוי למציאת החלקיק בנקודות התפנית הקלאסית קטן בערך פי 3 בלבד מהסיכוי המקסימלי בכל המשתנה. זו הסתברות משמעותית!

בתרגול יחושבו האינטגרלים הללו.

נחשב כעת את $\psi_1(x)$:

מתוך הנוסחאות שרשמנו נקבל: $E_1=\frac{3}{2}\hbar\omega$; $\psi_1(x)=\left(\frac{4\alpha^3}{\pi}\right)^{1/4} x e^{-\alpha x^2/2}$

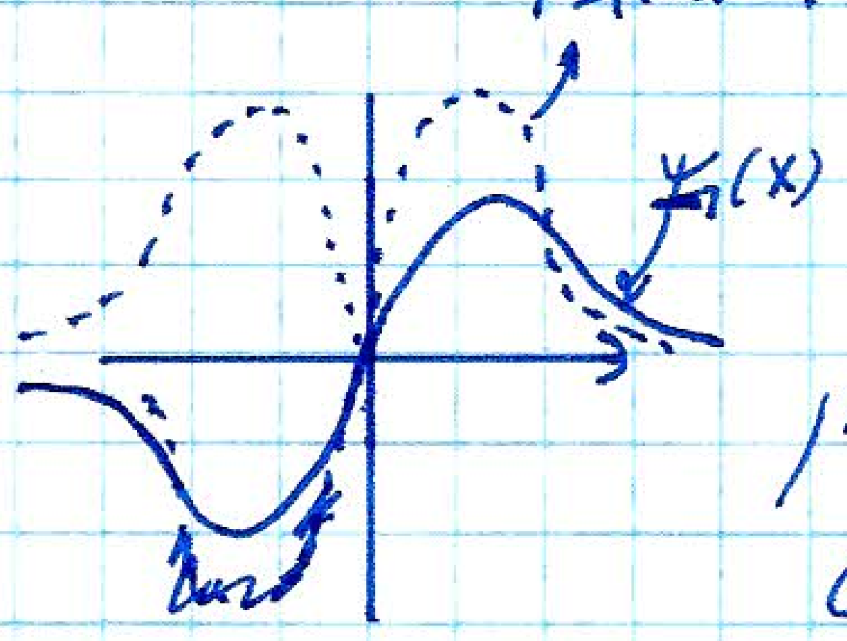


נצייר את הפונקציה:

לפונקציה נקודת צומת אחת.

עבור חלקיק בקופסא לפונקציה בעלת מספר קוונטי n היו n-1 צמתים. עבור אוסצילטור הרמוני מס' הצמתים שווה למספר הקוונטי N.

נובע מפולינומי הרמיט שהם מסדר מקסימלי N שרשמנו.



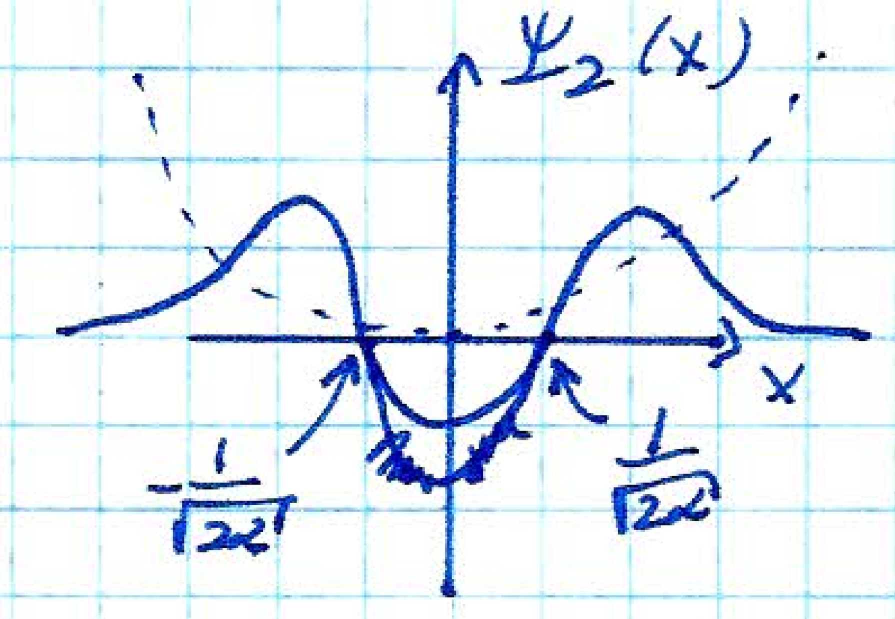
נתבונן בצפיפות ההסתברות $|\psi_1(x)|^2$:

צפיפות ההסתברות צרה יותר שכן ב-$(\psi)^2$ הגאוסיאן הוא $e^{-\alpha x^2}$ בניגוד שבפונ' הגל הגאוסיאן היה $e^{-\alpha x^2/2}$

ההסתברות למציאת החלקיק במרכז עבור $\psi_1(x)$ מתאפס - יש שם נקודת צומת. עבור ψ_0 הסיכוי שם היה המקסימלי.

נצייר גם את $\psi_2(x)$:

שוב לפי הנוסחאות: $E_2=\frac{5}{2}\hbar\omega$; $\psi_2(x)=\left(\frac{\alpha}{4\pi}\right)^{1/4}(2\alpha x^2-1)e^{-\alpha x^2/2}$



גם כאן וגם ב-ψ_1, פונ' הגל עושות מינהור. מידת המינהור הולכת וקטנה עם גדילת המספר הקוונטי.

עובדה מעניינת נוספת מתקבלת:

עבור חלקיק בקופסא ראינו שההסתברות למציאת חלקיק קלאסי בקופסא אחידה. עבור חלקיק קוונטי ראינו שבמספרים קוונטיים נמוכים ההסתברות אינה אחידה אך לפי עקרון ההתאמה כשהמס' הקוונטי גדל מס' הצמתים גדל וההסתברות מתקרבת לאחידה.

דבר מעניין קורה גם עבור אוסצילטור הרמוני. עבור חלקיק קלאסי ההסתברות המקסימלית למציאתו היא בנקודות התפנית שם מהירותו מתאפסת. עבור $\psi_0(x)$ ההסתברות המקסימלית למציאת החלקיק הייתה דווקא במרכז. אך ככל שהמספר הקוונטי גדל ההסתברות המקסימלית עוברת לקצוות ושוב נקבל את עקרון ההתאמה.

נבחן את קיום עקרון אי-הודאות עבור אוסצילטור הרמוני.

לצורך זה נאלץ לבצע מס' אינטגרלים של $\langle x\rangle, \langle x^2\rangle, \langle p\rangle, \langle p^2\rangle$
ונצטרך לחשב את $\Delta x \Delta p$.

- כפי שראינו בעבר: $\Delta x=\sqrt{\langle x^2\rangle-\langle x\rangle^2}$

נחשב את $\langle x\rangle$:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_N^*(x)\, x\, \psi(x)\, dx = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_N^2(x)\, x\, dx$$

ψ_N ממשיות.

טווח האינטגרל הוא סימטרי מ-$-\infty$ עד ∞, אם האינטגרנד הוא אי-זוגי אזי האינטגרל מתאפס.
מתוך הפונ' שחישבנו ניתן לראות כי הגאוסיאן הוא תמיד סימטרי והפולינומים מקיימים שכאשר N-זוגי הפולינום זוגי וכאשר N אי-זוגי הפולינום אי-זוגי (תכונות סימטריות של y) ולכן $\psi_N(x)$ מקיימת:

$$\psi_N(x) \to \begin{cases} N \text{ זוגי - זוגית} \\ N \text{ אי-זוגי - אי-זוגית} \end{cases}$$

ולכן כאשר מעלים בריבוע $\psi_N^2(x)$ היא תמיד זוגית. מכיוון שהאינטגרל כולו מתאפס:

$$\boxed{\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \overset{\text{אי-זוגי}}{x}\, \underbrace{\psi_N^2(x)}_{\text{זוגית}}\, dx = 0}$$

כעת נחשב את $\langle x^2\rangle$

ראשית נחשב את $\langle y^2\rangle$ כאשר מתקיים $\langle y^2\rangle=\alpha\langle x^2\rangle$

$$\langle y^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_N^*(y)\, y^2\, \psi_N(y)\, dy =$$

האינטגרל הזה לא יכול להתאפס אחרת נקבל $\Delta x=0$ ועקרון אי הודאות לא מתקיים.

$$= N_N^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_N(y)\, y^2\, H_N(y)\, e^{-y^2}\, dy =$$

עלינו להתחשב את מקדם הנרמול ל-y ולכן מקדם הנרמול יהיה מוכפל עם $\frac{1}{\sqrt{\alpha}}$.

$$= \frac{1}{2^N N!}\left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, H_N(y)\, y^2 H_N(y) e^{-y^2} dy =$$

נוכל לפשט את האינטגרל ע"י שימוש בנוסחת הרקורסיה שרשמנו:

$$y H_N(y) = N H_{N-1}(y) + \frac{1}{2} H_{N+1}(y)$$

$$\Rightarrow y^2 H_N(y) = N y H_{N-1}(y) + \frac{1}{2} y H_{N+1}(y) =$$

$$= N\left[(N-1) H_{N-2}(y) + \frac{1}{2} H_N(y)\right] + \frac{1}{2}\left[(N+1) H_N(y) + \frac{1}{2} H_{N+2}(y)\right] =$$

$$= \left(\frac{N}{2} + \frac{N}{2} + \frac{1}{2}\right) H_N(y) + N(N-1) H_{N-2}(y) + \frac{1}{4} H_{N+2}(y) =$$

$$= \left(N + \frac{1}{2}\right) H_N(y) + N(N-1) H_{N-2}(y) + \frac{1}{4} H_{N+2}(y)$$

נציב בחזרה באינטגרל ונקבל:

$$= \frac{1}{2^N N!}\left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dy\, H_N(y)\left[\left(N+\tfrac{1}{2}\right) H_N(y) + N(N-1) H_{N-2}(y) + \frac{1}{4} H_{N+2}(y)\right] e^{-y^2} dy =$$

$$= \frac{1}{2^N N!}\left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2} \cdot \left\{ \left(N+\frac{1}{2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dy \left(H_N(y) e^{-\frac{1}{2}y^2}\right)\left(H_N(y) e^{-\frac{1}{2}y^2}\right) + \right.$$

$$+ N(N-1) \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy \left(H_N(y) e^{-\frac{1}{2}y^2}\right)\left(H_{N-2}(y) e^{-\frac{1}{2}y^2}\right)}_{=0} +$$

$$+ \frac{1}{4} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dy \left(H_N(y) e^{-\frac{1}{2}y^2}\right)\left(H_{N+2}(y) e^{-\frac{1}{2}y^2}\right)}_{=0} =$$

שני האינטגרלים האחרונים עד כדי מקדם נרמול, הינם

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_N^*(x)\, \psi_{N-2}(x)\, dx = 0; \quad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_N^*(x)\, \psi_{N+2}(x)\, dx = 0$$

שנזכור מתאפסים שכן אלו הן פו' עצמיות שונות, השייכות לע"ע שונים של אופרטור הרמיטי ולכן הן אורתוגונליות.

מכאן שאם נותר רק האינטגרל הבא:

$$= \left(N+\tfrac{1}{2}\right)\frac{1}{2^N N!}\left(\frac{1}{\pi}\right)^{1/2}\int_{-\infty}^{\infty} dy\left[H_N(y)e^{-\frac{1}{2}y^2}\right]\cdot\left[H_N(y)e^{-\frac{1}{2}y^2}\right] =$$

$$= \left(N+\tfrac{1}{2}\right)\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_N(y)|^2 dy}_{1} = N+\tfrac{1}{2}$$

כלומר:
$$\langle y^2\rangle = N+\tfrac{1}{2} \Rightarrow \boxed{\langle x^2\rangle = \frac{N+\frac{1}{2}}{\alpha} = \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)\left(N+\tfrac{1}{2}\right)}$$

ולכן:
$$\boxed{\Delta x = \left[\frac{\left(N+\frac{1}{2}\right)\hbar}{m\omega}\right]^{1/2}}$$

נחשב כעת את $\langle p\rangle$:

$$\boxed{\langle p\rangle = \langle\psi_N| -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}|\psi_N\rangle = 0}$$

האינטגרל מתאפס שכן ψ_N הינה זוגית - $\frac{\partial}{\partial x}$ ישנה את הזוגיות של ψ_N כלומר הינו אי-זוגיות בעוד שהאינטגרציה נעשית על תחום סימטרי סביב ה-0 - מ-∞- ועד ∞.

סיבה נוספת כפי שראינו בעבר: ψ_N הינן ממשיות ולכן $\langle\psi_N|\hbar\frac{\partial}{\partial x}|\psi_N\rangle$ הינו גודל ממשי ולכן אם $\langle\psi_N|\hbar\frac{\partial}{\partial x}|\psi_N\rangle$ שונה מ-0 אזי $\langle p\rangle$ יוצא מדומה טהור וכיוון שהאופרטור צריך להיות ממשי חייב להתקיים כי $\langle p\rangle = 0$.

- חישוב $\langle p^2\rangle$:

$$\langle p^2\rangle = \langle\psi_N| -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}|\psi_N\rangle$$

בעקרון ניתן להשתמש בנוסחאות הרקורסיה עבור הנגזרת של פולינומי הרמיט אך התוצאה יוצאת מסובכת לחישוב. במקום זאת נעשה פעולה דומה לזו שביצענו עבור חלקיק בקופסא.

ידוע כי מתקיים: $E_N = \frac{\langle p^2\rangle}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\langle x^2\rangle$

$$\Rightarrow \langle p^2\rangle = 2mE_n - m^2\omega^2\langle x^2\rangle =$$

את $\langle E_N\rangle = E_N$ אנו יודעים ואת $\langle x^2\rangle$ כבר חישבנו ולכן:

$$= 2\cancel{m}\hbar\omega(N+\tfrac{1}{2}) - \cancel{m^2}\cancel{\omega^2}\frac{\hbar}{\cancel{m\omega}}(N+\tfrac{1}{2}) = m\omega\hbar(N+1/2)$$

כלומר: $\boxed{\langle p^2\rangle = m\omega\hbar(N+\frac{1}{2})}$

ולכן: $\boxed{\Delta p = \sqrt{m\omega\hbar(N+\frac{1}{2})}}$

וכעת נוכל לבחון את אי-הוודאות:

$$\Delta x\Delta p = \left[\frac{\hbar}{\cancel{m\omega}}(N+\tfrac{1}{2})\cdot\cancel{m\omega}\hbar(N+\tfrac{1}{2})\right]^{1/2} = \sqrt{\hbar^2(N+\tfrac{1}{2})^2} = \hbar(N+\tfrac{1}{2})$$

כלומר: $\boxed{\Delta x\Delta p = \hbar(N+\frac{1}{2})} \geq \frac{\hbar}{2}$

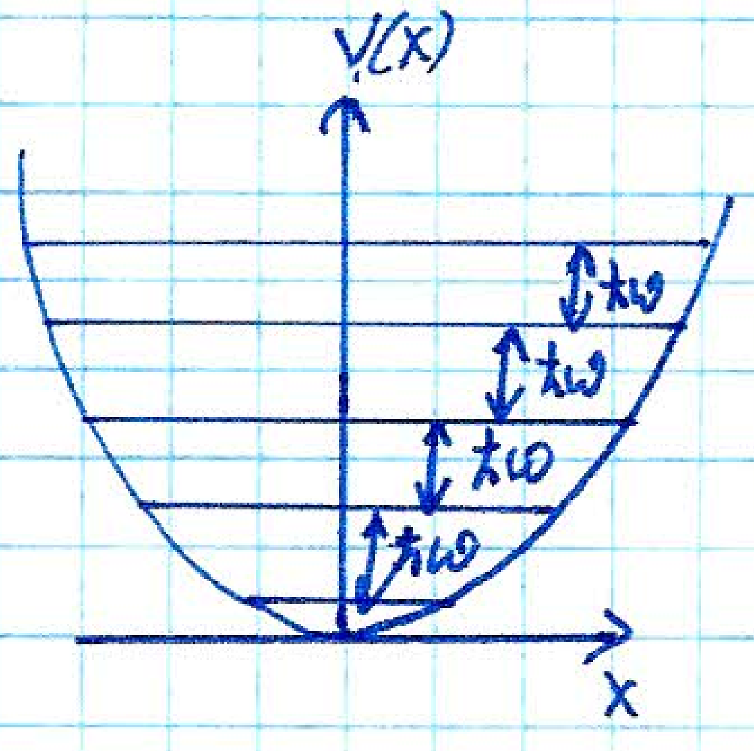
חשוב: כלומר עקרון אי הוודאות מתקיים $\Delta x\Delta p \geq \hbar/2$ עקב כך גם במכא׳ יש עקרון כזה דומות לחוק קלאסי.

קיבלנו ישירות את כל הגדלים המבוקשים הרלוונטיים ואת עקרון אי הוודאות ללא ביצוע מפורש של אינטגרל ע״י פולינומי הרמיט.

כעת עבור $N=0$ נקבל כי $\Delta x\Delta p = \frac{\hbar}{2}$ כלומר אי-הוודאות הינה מינימלית! עבור מצב היסוד של האוסצילטור ההרמוני. ככל שעולים ברמת האנרגיה אי-הוודאות גדלה. זהו מצב ייחודי בו אי-הוודאות היא מינימלית.

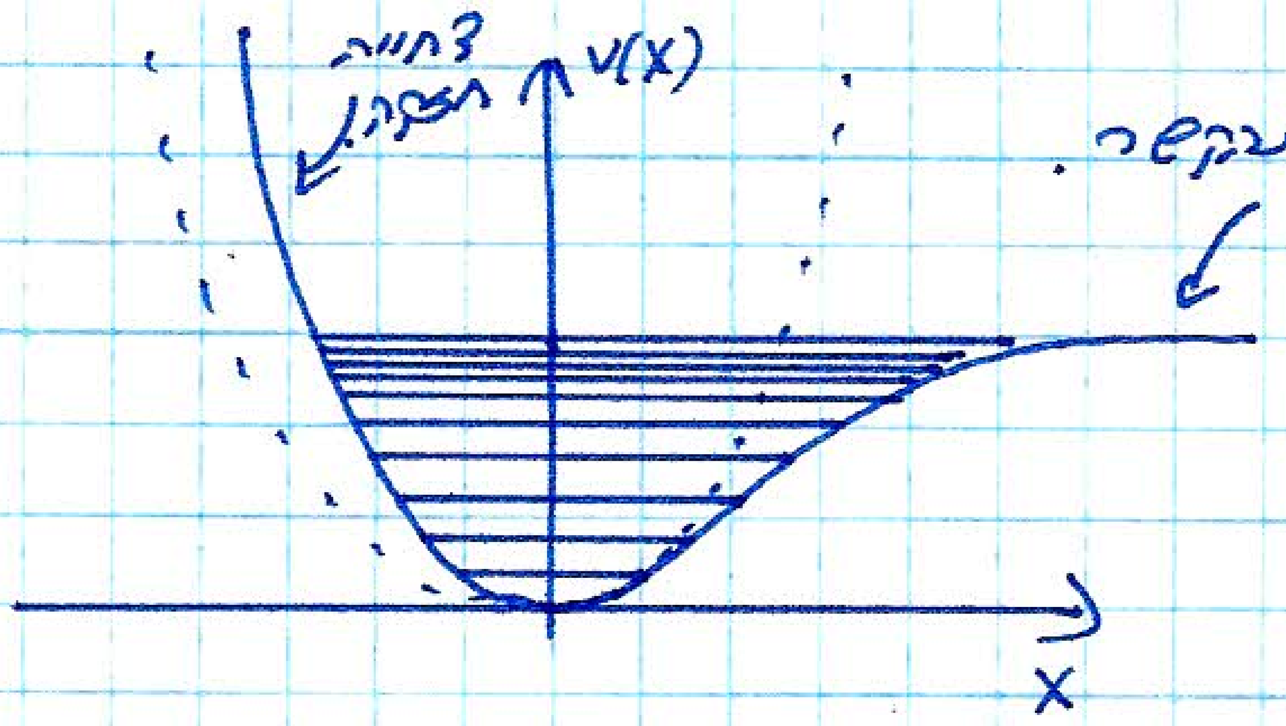
עקב הצורה הגאוסית של פו׳ הגל של מצב היסוד.

מגבלות המודל עבור ויברציות מולקולריות



קיבלנו כי המרווחים בין הרמות הינם קבועים ונו קיימות אינסוף רמות אנרגיה: $\Delta E_N = \hbar\omega$.
אנו משתמשים במודל הזה בשביל לתאר ויברציות מולקולריות אך אנו יודעים כי אם נביא מספיק אנרגיה לקשר הקשר ישבר. עבור אוסצילטור הרמוני ישנן אינסוף רמות ולא משנה כמה אנרגיה נותן למערכת תישאר קשורה.

קשר כימי, אם כן, יוכל להיות מתואר ע"י פוטנציאל הרמוני בקרבת המרכז. עבור קשר כימי אמיתי הפוטנציאל סוטה מהפוטנציאל ההרמוני באופן הבא:



במרחקים גדולים הקשר נשבר ובמרחקים קצרים נקבל דחיה חזקה. רק בטווח קטן סביב המינימום התיאור ההרמוני טוב. בפוטנציאל האנהרמוני המרווחים בין רמות האנרגיה הולכים ומצטמצמים ככל שעולים באנרגיה כך שלקראת שבירת הקשר מגיעים לרצף רמות.