תרגול מספר 5

אוסצילטור הרמוני קוונטי

תוכן עניינים

1 חזרה קצרה וקצת מתמטיקה

אוסצילטור הרמוני קוונטי מוגדר על ידי ההמילטוניאן

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

אם נגדיר $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$ הפונקציות העצמיות של ההמילטוניאן והאנרגיות המתאימות להן יהיו

$$\begin{aligned} \psi_\nu(x) &= N_\nu H_\nu(\sqrt{\alpha}x)\, e^{-\frac{\alpha x^2}{2}},\ \nu \in \{0,\, 1,\, 2,\, ...\} \\ N_\nu &= \frac{1}{\sqrt{2^\nu \nu!}}\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}, \\ E_\nu &= \hbar\omega\left(\nu + \frac{1}{2}\right). \end{aligned}$$

פונקציות הגל הן אורתונורמליות:

$$\int \psi_i^*(x)\,\psi_j(x)\,\mathrm{d}x = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j, \\ 0 & i \neq j. \end{cases}$$

הפונקציות $H_\nu(\xi)$ נקראות פולינומי הרמיט (Hermite Polynomials), ומקיימות מספר תכונות מתמטיות. נהוג להגדיר אותם בכמה דרכים, ואנו נשתמש בהגדרה המועדפת על פיזיקאים. ניתן למצוא אותם, במספר רב של דרכים, למשל בעזרת הפונקציה היוצרת שלהם:

$$H_\nu(\xi) = (-1)^\nu e^{\xi^2}\frac{\mathrm{d}^\nu}{\mathrm{d}\xi^\nu}e^{-\xi^2},$$

או מיחס הנסיגה שהם מקיימים ומשתי הפונקציות הראשונות:

$$\begin{aligned} \xi H_\nu(\xi) &= \nu H_{\nu-1}(\xi) + \frac{1}{2}H_{\nu+1}(\xi), \\ H_0(\xi) &= 1, \\ H_1(\xi) &= 2\xi. \end{aligned}$$

בתרגיל ובבית נזדקק למספר אינטרגלים. הם נקראים אינטגרלים גאוסיים וכבר נתקלתם בהם בעבר:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x &= \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2}\mathrm{d}y = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n}e^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x &= (-1)^n\left(\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^n\int e^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x = (-1)^n\left(\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^n\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \\ \int_{-\infty}^{y} e^{-x^2}\mathrm{d}x &= \frac{\sqrt{\pi}}{2}\mathrm{Erf}(y), \\ \int_{y}^{\infty} e^{-x^2}\mathrm{d}x &= \frac{\sqrt{\pi}}{2}\mathrm{Erfc}(y). \end{aligned}$$

שני האינטגרלים האחרונים ניתנים לחישוב נומרי בלבד באופן כללי: הפונקציות $\mathrm{Erf}\,(y)$ ו־$\mathrm{Erfc}\,(y) = 1 - \mathrm{Erf}\,(y)$ נמצאות הדרך כלל במחשבונים מדעיים מתוחכמים, ואפשר להשתמש במחשבון של Google (נסו להקליד למשל "erfc(0.3)" בשדה החיפוש).

2 הגבול האסור קלאסית ומנהור קוונטי

עבור אוסצילטור הרמוני קלאסי, מתקיים $H = E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. האיבר הראשון מבטא אנרגיה קינטית והשני פוטנציאלית; כיוון שהאנרגיה הכוללת היא קבוע תנועה, הערך הגבוה ביותר של x מתקבל כאשר התנע מתאפס, כלומר

$$\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \leq E \Rightarrow |x| < \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \Rightarrow -\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}} \leq x \leq \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}.$$

ערכי x התחומים בין הגבולות הללו הינם התחום המותר קלאסית.

שאלה: מהו התחום האסור קלאסית עבור המצב ה־ν של אוסצילטור הרמוני?
פיתרון: האנרגיה במצב זה היא $E_\nu = \hbar\omega\left(\nu + \frac{1}{2}\right)$, לכן

$$\begin{aligned} -\sqrt{\frac{2E_\nu}{m\omega^2}} \leq \quad & x \quad \leq \sqrt{\frac{2E_\nu}{m\omega^2}}, \\ \sqrt{\frac{2E_\nu}{m\omega^2}} \quad & = \quad \sqrt{\frac{2\hbar\omega\left(\nu+\frac{1}{2}\right)}{m\omega^2}} = \sqrt{2\frac{\hbar}{m\omega}\left(\nu + \frac{1}{2}\right)} = \sqrt{\frac{(2\nu+1)}{\alpha}} \end{aligned}$$

אם נציב את השורה השניה באי־השיווין, נקבל:

$$\boxed{-\sqrt{\frac{(2\nu+1)}{\alpha}} \leq x \leq \sqrt{\frac{(2\nu+1)}{\alpha}}}.$$

שאלה: מה ההסתברות שהאלקטרון במצב היסוד ימצא בתחום האסור קלאסית?
פיתרון: עבור $\nu = 0$, אי־השיוויון הקודם הופך ל־$-\frac{1}{\sqrt{\alpha}} \leq x \leq \frac{1}{\sqrt{\alpha}}$. פונקציית הגל המתאימה הינה

$$\psi_0(x) = \overbrace{N_0}^{=\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}} \overbrace{H_0\left(\sqrt{\alpha}x\right)}^{=1} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}.$$

נציב ונחשב את ההסתברות:

$$\begin{aligned} P\left(|x| \geq \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\right) &= P\left(x \geq \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\right) + P\left(x \leq -\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\right) \\ &= \int_{1/\sqrt{\alpha}}^{\infty} |\psi_0|^2\,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{-1/\sqrt{\alpha}} |\psi_0|^2\,\mathrm{d}x \\ &= \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{1/\sqrt{\alpha}}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x + \sqrt{\frac{\alpha}{\pi}}\int_{-\infty}^{-1/\sqrt{\alpha}} e^{-\alpha x^2}\mathrm{d}x \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{1}^{\infty} e^{-y^2}\mathrm{d}y + \sqrt{\frac{1}{\pi}}\int_{-\infty}^{-1} e^{-y^2}\mathrm{d}y \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{1}^{\infty} e^{-y^2}\mathrm{d}y = \mathrm{Erfc}\,(1) \approx \boxed{0.15}. \end{aligned}$$

שאלה: מה ההסתברות שהאלקטרון במצב המעורר הראשון ימצא בתחום האסור קלאסית?

פיתרון: עבור $\nu = 1$, אי־השיוויון הקודם הופך ל־$-\sqrt{\frac{3}{\alpha}} \leq x \leq \sqrt{\frac{3}{\alpha}}$. פונקציית הגל המתאימה הינה

$$\psi_1(x) = \overbrace{N_1}^{=\left(\frac{\alpha}{4\pi}\right)^{\frac{1}{4}}} \overbrace{H_1(\sqrt{\alpha}x)}^{=2\sqrt{\alpha}x} e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} = \left(\frac{4\alpha^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} x e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}.$$

נציב ונחשב את ההסתברות. הפעם, יהיה צורך להשתמש באינטגרציה בחלקים:

$$\begin{aligned}
P\left(|x| \geq \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\right) &= P\left(x \geq \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\right) + P\left(x \leq -\frac{1}{\sqrt{\alpha}}\right) \\
&= \int_{\sqrt{\frac{3}{\alpha}}}^{\infty} |\psi_1|^2 \,\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{-\sqrt{\frac{3}{\alpha}}} |\psi_1|^2 \,\mathrm{d}x \\
&= \sqrt{\frac{4\alpha^3}{\pi}} \int_{\sqrt{\frac{3}{\alpha}}}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x + \sqrt{\frac{4\alpha^3}{\pi}} \int_{-\infty}^{-\sqrt{\frac{3}{\alpha}}} x^2 e^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x \\
&= 2\sqrt{\frac{4\alpha^3}{\pi}} \int_{\sqrt{\frac{3}{\alpha}}}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} \mathrm{d}x = 2\sqrt{\frac{4\alpha^3}{\pi}} \frac{1}{\sqrt{\alpha^3}} \int_{\sqrt{3}}^{\infty} y^2 e^{-y^2} \mathrm{d}y \\
&= 2\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\sqrt{3}}^{\infty} \overbrace{y^1}^{f} \cdot \overbrace{y^1 e^{-x^2}}^{g'} \mathrm{d}y \\
&= 2\frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\overbrace{y}^{f} \cdot \overbrace{\left(-\frac{1}{2} e^{-y^2}\right)}^{g} \right] \Bigg|_{\sqrt{3}}^{\infty} - 2\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\sqrt{3}}^{\infty} \overbrace{1}^{f'} \cdot \overbrace{\left(-\frac{1}{2} e^{-y^2}\right)}^{g} \mathrm{d}y \\
&= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{3} e^{-3} + \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\sqrt{3}}^{\infty} e^{-y^2} \mathrm{d}y \\
&= \frac{2\sqrt{3}}{\sqrt{\pi}} e^{-3} + \mathrm{Erfc}\left(\sqrt{3}\right) \\
&\approx \boxed{0.11}.
\end{aligned}$$

3 קיום המשוואה הדיפרנציאלית

בכיתה לא נגזרו הפונקציות העצמיות של המילטוניאן האוסצילטור ההרמוני, אלא ניתן הפיתרון. ניתן לבדוק כי התנאי הדרוש, $\hat{H}\psi_\nu = E_\nu \psi_\nu$, אכן מתקיים בעזרת הצבת הפיתרון במשוואה דיפרנציאלית זו. נעשה זו עבור ψ_1:

שאלה: הוכיחו כי הפונקציה $\psi_1 = \left(\frac{4\alpha^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} x e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$ עצמית להמילטוניאן $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$, ומצאו במפורש את הערך העצמי.

פיתרון: ניתן ונוח להזניח את המקדם ולעבוד עם פונקציית הגל הלא מנורמלת $\psi = x e^{-\frac{\alpha x^2}{2}}$ (בדקו כי אתם מבינים מתי הנירמול חשוב!). ראשית, נחשב את השפעת הגזירה עליה:

$$\frac{\partial}{\partial x}\psi = \frac{\partial}{\partial x} x e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} = e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} - \alpha x^2 e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} = \left(1 - \alpha x^2\right) e^{-\frac{\alpha x^2}{2}},$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi &= \frac{\partial}{\partial x}\left(1-\alpha x^2\right)e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} = -2\alpha x e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} + \left(1-\alpha x^2\right)\frac{\partial}{\partial x}e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} \\ &= -2\alpha x e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} - \alpha x\left(1-\alpha x^2\right)e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} = \left(\alpha^2 x^3 - 3\alpha x\right)e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} \\ &= \left(\alpha^2 x^2 - 3\alpha\right)x e^{-\frac{\alpha x^2}{2}} = \left(\alpha^2 x^2 - 3\alpha\right)\psi.\end{aligned}$$

כעת, נותר רק להציב זאת במשוואה המקורית, ונציב את $\alpha = \frac{m\omega}{\hbar}$:

$$\begin{aligned}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\right)\psi &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\alpha^2 x^2 - 3\alpha\right) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right]\psi \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2 + \frac{\hbar^2}{2m}3\frac{m\omega}{\hbar} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi \\ &= \boxed{\frac{3}{2}\hbar\omega\psi = E_1\psi}.\end{aligned}$$

קיבלנו חזרה בתור הערך העצמי בדיוק את האנרגיה המתאימה למצב $\nu = 1$. כיוון שניתן להכפיל את שני אגפי המשוואה במקדם הנירמול $\left(\frac{4\alpha^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$, נוכל לכתוב גם

$$\hat{H}\psi = E_1\psi \Rightarrow \hat{H}\left(\frac{4\alpha^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\psi = E_1\left(\frac{4\alpha^3}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\psi \Rightarrow \boxed{\hat{H}\psi_1 = E_1\psi_1}.$$