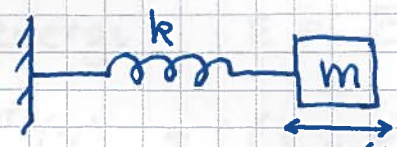


# Harmonisk oscillator [PCH 3.5; DTG 2.3.2; IØ 3.4]

Klassisk:



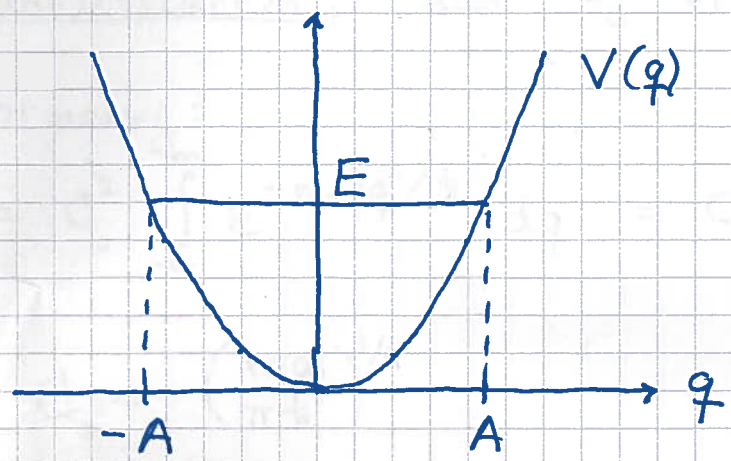
$q(t)$  = utsving fra likevekt

Hookes lov:  $F(q) = -kq \xrightarrow{N2} \ddot{q} + \omega^2 q = 0 ; \omega^2 = \frac{k}{m}$

Med f.eks.  $q(0) = A$  og  $\dot{q}(0) = 0 : q(t) = A \cos \omega t$

$$E = K + V = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 + \frac{1}{2} k q^2 = \frac{1}{2} k A^2$$

Potensial:  $V(q) = \frac{1}{2} k q^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 q^2$



Klassiske  
vendepunkter:  
 $q = \pm A$

Med QM skal vi som vanlig løse TUSL:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dq^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 \psi = E \psi$$

Med  $V(q)$  symm. om  $q=0$  må egenfunk.  $\psi(q)$  bli symm. og antisymm. Forventer symm. grunntilstand uten nullpunkter og vekselvis AS og S eksiterte tilstander med økende antall nullpunkter.

Dimensjonsløs koordinat:  $x = q \cdot \sqrt{m\omega/\hbar}$

— " — energi:  $\varepsilon = E/(\hbar\omega/2)$

$$\text{TUSL: } \psi''(x) + (\varepsilon - x^2)\psi(x) = 0$$

Vi ser (næsten) uten videre at

$$\psi_0(x) = C_0 e^{-x^2/2}$$

er en løsning, siden  $\psi_0'' = C_0 e^{-x^2/2} (x^2 - 1)$ ,

slik at  $\varepsilon_0 = 1$  og  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ . Dette må være grunntilstanden, siden  $\psi_0$  er symm. uten nullpunkter.

Normering:

$$1 = C_0^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\omega q^2/\hbar} dq = C_0^2 \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx}_{=\sqrt{\pi}}$$

$$\Rightarrow C_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

Forventer (vet!) at 1. eksiterte tilst. er antisymm. med 1 nullpunkt; vi prøver/gjetter

$$\psi_1(x) = C_1 x e^{-x^2/2},$$

og innsetting i TUSL viser at  $\psi_1$  er løsning:

$$\underbrace{C_1 (x^3 - 3x) e^{-x^2/2}}_{=\psi_1''} + C_1 (\varepsilon_1 x - x^3) e^{-x^2/2} = 0$$

Tilhørende energiegenverdi:  $\varepsilon_1 = 3$  ;  $E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$

Prøver generell løsning

$$\psi(x) = v(x) e^{-x^2/2}$$

("Potensrekkeметoden")

med polynom

$$v(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$$

der vi vet at  $v_0 = C_0 = a_0$  og  $v_1 = C_1 x = a_1 x$ .

Mistenker at eksakte tilstander er vekselvis symm. og antisymm. med økende antall nullpunkter, dvs  $v_n(x)$  bør være polynom av orden  $n$ , slik at  $a_{n+1} = a_{n+2} = \dots = 0$ .

Bekreftes ved innsetting i TUSL:

$$\begin{aligned} \psi'' &= \frac{d}{dx} (v' e^{-x^2/2} - x v e^{-x^2/2}) \\ &= (v'' - x v' - x v' - v + x^2 v) e^{-x^2/2} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow (v'' - 2x v' - v + x^2 v + \epsilon v - x^2 v) e^{-x^2/2} = 0$$

$$\Rightarrow v'' - 2x v' + (\epsilon - 1) v = 0$$

$$v = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k \quad ; \quad v' = \sum_{k=1}^{\infty} a_k k x^{k-1} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+1} (k+1) x^k \quad ;$$

$$v'' = \sum_{k=2}^{\infty} a_k k(k-1) x^{k-2} = \sum_{k=0}^{\infty} a_{k+2} (k+2)(k+1) x^k$$

$$\Rightarrow \sum_{k=0}^{\infty} \underbrace{\{ a_{k+2} (k+2)(k+1) - 2 a_k k + (\epsilon - 1) a_k \}}_{= 0 \text{ for enhver } k} x^k = 0$$

$$\Rightarrow a_{k+2} = \frac{2k + 1 - \epsilon}{(k+1)(k+2)} a_k \quad ; \quad k=0,1,2,\dots$$

- $a_0$  og  $a_1$  bestemmes med normering av hhv  $\psi_0$  og  $\psi_1$
- $a_0$  gir  $a_2$  gir  $a_4$  etc ;  $a_1$  gir  $a_3$  gir  $a_5$  etc

Anta at potensrekkene ikke bryter av.

Da blir  $a_{k+2} \approx (2/k) a_k$  for store  $k$ .

Da er  $v(x)$  "praktisk talt" funksjonen  $e^{x^2}$ , fordi

$$e^{x^2} = 1 + x^2 + \frac{1}{2!} x^4 + \dots = \sum_{k=0,2,4,\dots} \frac{x^k}{(k/2)!}$$

dvs med

$$\frac{a_{k+2}}{a_k} = \frac{(k/2)!}{(k/2 + 1)!} = \frac{1}{\frac{k}{2} + 1} \approx \frac{2}{k} \quad \text{for store } k$$

Men da divergerer  $\psi(x)$  for store  $|x|$ :

$$\psi(x) = v(x) e^{-x^2/2} \approx e^{x^2 - x^2/2} = e^{x^2/2} \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} \infty$$

Ikke fysisk akseptabelt. Potensrekkene må bryte av.

$$\Rightarrow 2k+1 - \epsilon_k = 0 \quad \Rightarrow \quad \epsilon_k = 2k+1 \quad ; \quad k=0,1,2,\dots$$

$$\epsilon_0 = 1 \quad \Rightarrow \quad a_2 = a_4 = a_6 = \dots = 0$$

$$\text{og } a_1 = a_3 = a_5 = \dots = 0$$

(fordi  $a \neq 0$  gir divergent ~~til~~  $v \cdot e^{-x^2/2}$ )

$$\epsilon_1 = 3 \quad \Rightarrow \quad a_3 = a_5 = a_7 = \dots = 0$$

$$\text{og } a_0 = a_2 = a_4 = \dots = 0$$

(fordi  $a_0 \neq 0$  gir divergent  $v \cdot e^{-x^2/2}$ )

Generelt:  $\epsilon_k = 2k+1$ ;  $U_k(x) = \text{polynom av orden } k$  (71)

Kravet om fysisk mulige løsninger har gitt kvantisert energi:

$$E_n = \frac{1}{2} \hbar \omega \epsilon_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

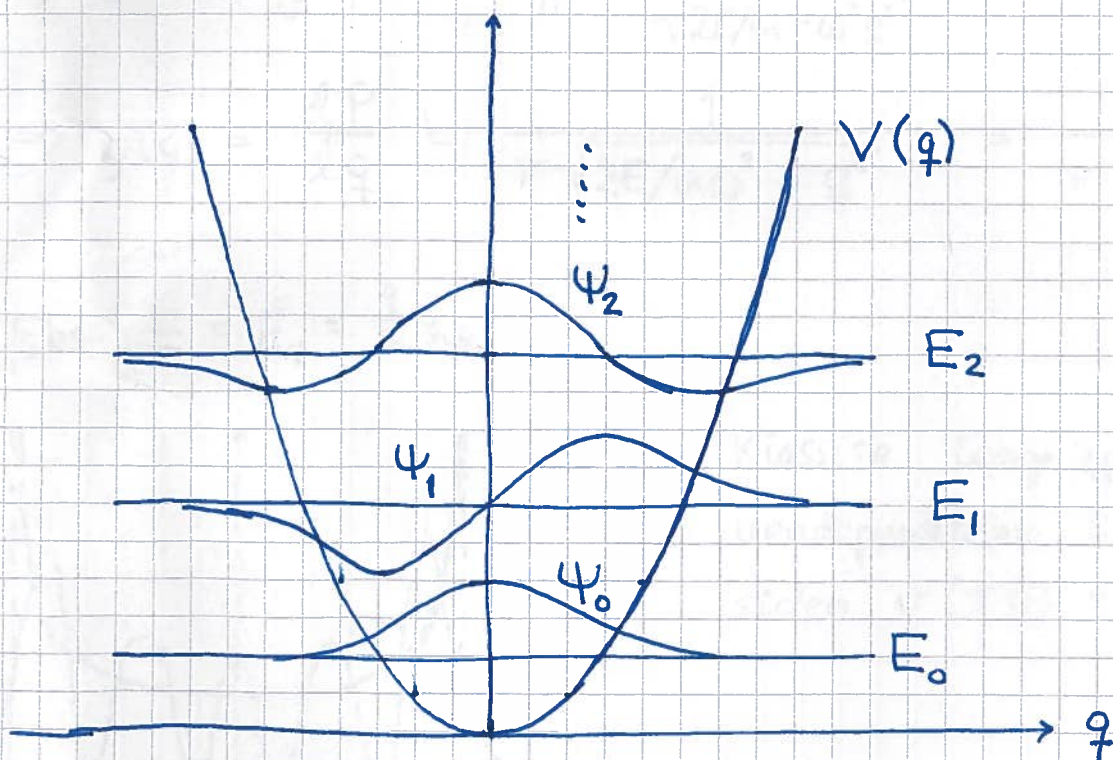
Normerte egenfunksjoner:

$$\Psi_n(q) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n!}} \cdot e^{-m\omega q^2/2\hbar} \cdot H_n\left(\frac{q}{\sqrt{\hbar/m\omega}}\right)$$

Hermite-polynomene:

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_2(x) = 4x^2 - 2,$$

$$H_3(x) = 8x^3 - 12x, \quad H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12, \quad \dots$$



# Sammenligning med klassisk oscillator

[PCH 3.5.5 ; DFG 2.3.2 ; IØ 3.4.2]

- Sannsynlighetsfordelingen

QM:  $\rho_n(q) = dP_n/dq = |\psi_n(q)|^2$

Klassisk:

$dP = \text{andelen oppholdstid p\aa } (q, q+dq) = \frac{dt}{T}$

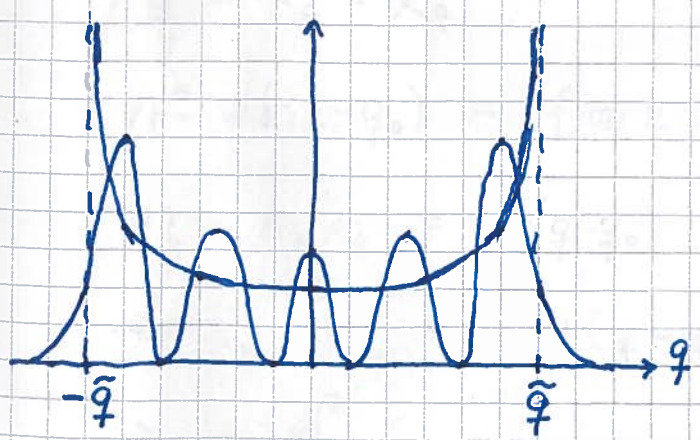
med  $T = \frac{2\pi}{\omega} = \text{perioden}$ ;  $dt = 2 \cdot \frac{dq}{v}$  der

$v = \sqrt{2K/m} = \sqrt{2(E-V)/m} = \sqrt{2E/m - \omega^2 q^2}$

$\Rightarrow dP = \frac{2dq}{vT} = \frac{\omega}{\pi} \cdot \frac{dq}{\sqrt{2E/m - \omega^2 q^2}}$

$\Rightarrow \rho(q) = \frac{dP}{dq} = \frac{1}{\pi \sqrt{2E/m\omega^2 - q^2}} = \frac{1}{\pi \sqrt{\tilde{q}^2 - q^2}}$

Eks:  $E = E_4 = \frac{9}{2} \hbar \omega$

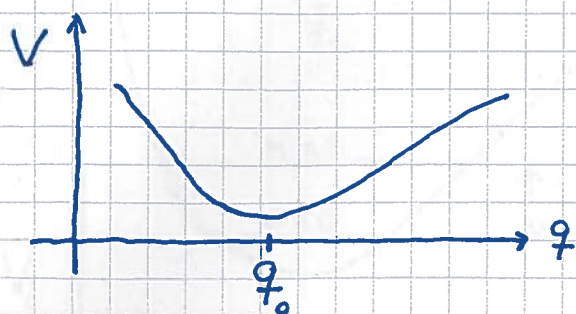


Klassisk lange opphold ved vendepunktene  $\pm \tilde{q} = \pm 3\sqrt{\hbar/m\omega}$  siden  $v(\pm \tilde{q}) = 0$ .

Kvantemek.  $\rho_n(q)$  oscillerer, mer og mer med \o st\o kende n, men blir for\o pning mer og mer lik den klassiske  $\rho(q)$ .

- Anvendelser

Har ofte et tilnærmet harmonisk potensial:



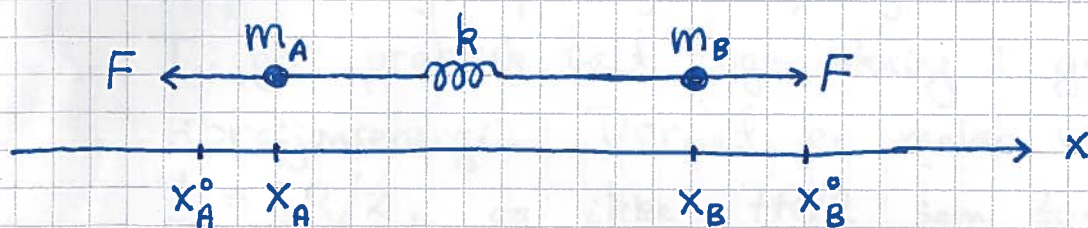
Nær den stabile likevekten:

$$V(q) = V(q_0) + (q - q_0)V'(q_0) + \frac{1}{2}(q - q_0)^2 V''(q_0) \dots$$

$$\approx V(q_0) + \frac{1}{2}(q - q_0)^2 V''(q_0)$$

Dvs: Med små utsving fra likevekt er dette en tilnærmet harmonisk oscillator med  $k = m\omega^2 = V''(q_0)$  og energinivåer  $E_n = V(q_0) + (n + 1/2)h\omega$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ )

Eks: Toatomige molekyler



$$q_0 = x_B^0 - x_A^0 = \text{bindingslengde i likevekt}$$

$$q = x_B - x_A$$

$$F = k(q - q_0) = \text{fjærkraft}$$

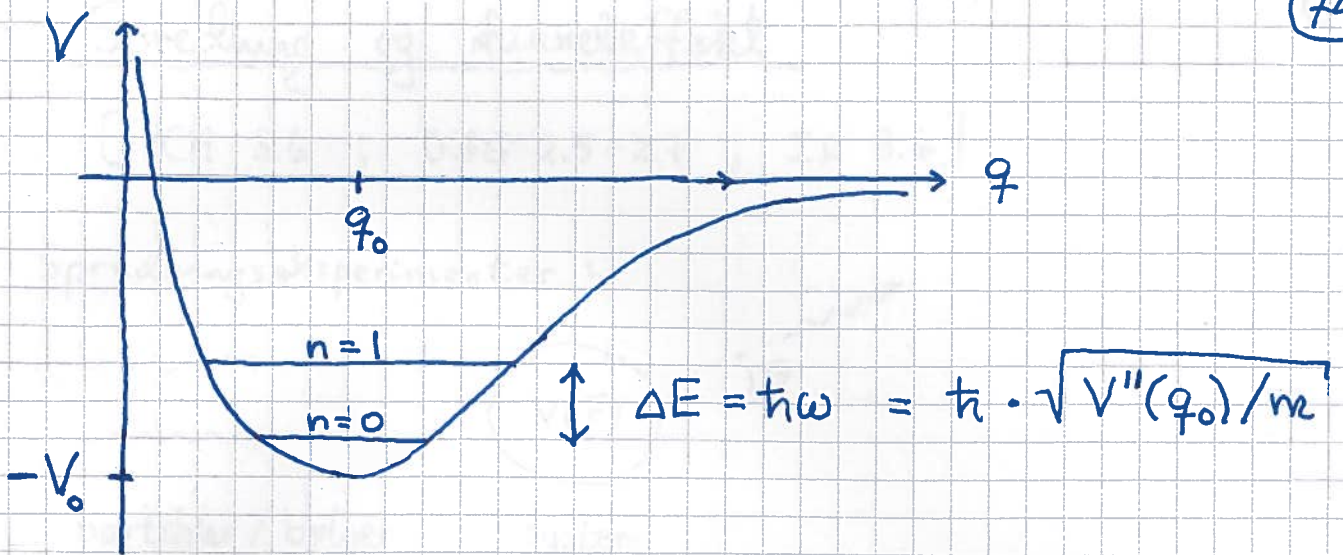
$$N2: m_A \ddot{x}_A = k(q - q_0) ; m_B \ddot{x}_B = -k(q - q_0)$$

$$\Rightarrow \ddot{x}_B - \ddot{x}_A = -k(q - q_0) \left[ \frac{1}{m_B} + \frac{1}{m_A} \right] = -\frac{k}{m} (q - q_0)$$

$$\Rightarrow m \frac{d^2}{dt^2} (q - q_0) = -k (q - q_0)$$

dvs enkel harm. osc. med redusert masse  $m$  gitt ved

$$\frac{1}{m} = \frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B}$$



Eks: For CO er  $f \approx 6.4 \cdot 10^{13}$  Hz, ( $m \approx 6.9 u$ )  
 dvs  $\hbar\omega \approx 0.26$  eV, mye større enn  $k_B T$  ved  
 romtemperatur (26 meV). De fleste molekylene  
 i en gass med CO befinner seg da i grunntilstanden  
 mhp vibrasjonsfrihetsgradene, og en liten økning i  
 T gir praktisk talt ingen økning i gassens  
 vibrasjonsenergi. Dermed er molar varmekapasitet  
 $C_V = 5R/2$ , og ikke  $7R/2$  som forventet med  
 det klassiske eknipartisjonsprinsippet.

[Kvantisering av rotasjonsenergien diskuteres senere,  
 i forbindelse med kvantisering av dreieimpuls.]