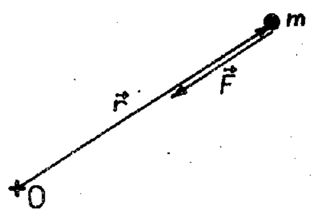
VII. HARMONICKÝ OSCILÁTOR

1. Úvod

Ne náhodou věnujeme úvodní kapitolu významné fyzikální soustavě – jednorozměrnému (lineárnímu) harmonickému oscilátoru. Detailní rozbor kvantověmechanického řešení harmonického oscilátoru je neobyčejně důležitý z fyzikálního hlediska, neboť existuje velký počet nejrůznějších soustav, jejichž řešení se redukuje (alespoň aproximativně) na úlohu o harmonickém oscilátoru. Navíc však jde o jeden z mála kvantověmechanických systémů, které lze řešit přesně. Protože některé kroky řešení, které je provedeno v odst.2.1, se v mírně obměněné formě objeví i v následujících dvou kapitolách, je jim zde věnováno více místa. Algebraické řešení provedené v odst.2.2 ilustruje, že vlastní hodnoty a vlastní vektory hamiltoniánu lze nalézt bez řešení diferenciální Schrödingerovy rovnice, pouze s využitím postulovaných komutačních relací. Kromě toho se zde objeví kreační a anihilační operátory známé z kap.VI, které umožňují velice přehlednou formulaci úlohy o souboru nezávislých harmonických oscilátorů v odst.3. V odst.4 jsou kvantověmechanické výsledky doplněny o základní závěr statistické mechaniky, čímž se značně rozšíří okruh možných aplikací. Závěrečný odstavec 5 je pak věnován několika aplikacím na konkrétní systémy.

1.1) Harmonický oscilátor v klasické mechanice

O harmonickém oscilátoru mluvíme vždy, když jde o částici (přesně: hmotný bod) s hmotností m, která je k nějakému pevnému bodu O přitahována silou úměrnou vzdálenosti od O (obr.1); pro sílu působící na částici tedy platí



Obr. 1

$$\vec{F} = -k\,\vec{r}\,, \tag{1}$$

kde k je konstanta úměrnosti.
Popsaná soustava představuje harmonický oscilátor v 3-rozměrném prostoru. Jestliže konstanta k nezávisí na směru výchylky $\vec{r}$, jde o tzv. izotropní harmonický oscilátor.

Newtonova pohybová rovnice pro takový oscilátor je

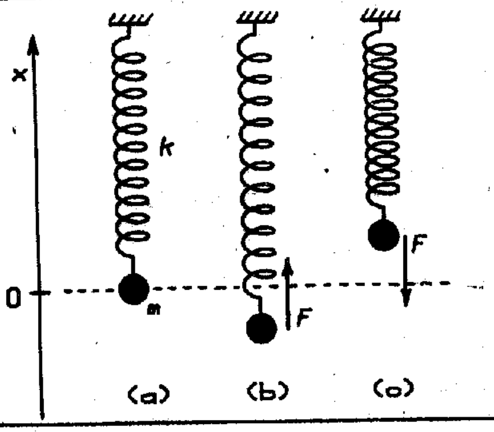
$$m\,\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -k\,\vec{r}\,, \tag{2a}$$

což rozepsáno do složek ($\vec{r}=(x,y,z)$) dá 3 rovnice

$$m\,\frac{d^2x}{dt^2} = -k\,x\,,\quad m\,\frac{d^2y}{dt^2} = -k\,y\,,\quad m\,\frac{d^2z}{dt^2} = -k\,z \tag{2b}$$

Pro úplnost jen poznamenejme, že pro anizotropní 3-rozměrný oscilátor (k závisí na směru výchylky) je vždy možné najít takovou kartézskou souřadnou soustavu, že v ní opět dostaneme 3 rovnice (2b), ovšem s třemi různými konstantami k.

Separace proměnných v rovnicích (2b) (tím rozumíme, že v každé z rovnic vystupuje jen jedna z proměnných x,y,z) nám z matematického hlediska redukuje úlohu o 3-rozměrném oscilátoru na problém tří jednorozměrných oscilátorů. V dalším se proto omezíme jen na studium jednorozměrného harmonického oscilátoru, tj. částice, která se může pohybovat pouze po přímce, přičemž síla, která na ni působí, je úměrná vzdálenosti od nějakého pevného bodu O na této přímce. Ztotožníme-li přímku s osou Ox a bod O s počátkem, bude působící síla $F = -kx$ a Newtonova pohybová rovnice $m\ddot{x} = -kx$. Jednoduchá realizace takové soustavy je na obr.2.



Obr. 2
Těleso s hmotností m je zavěšené na pružině. V rovnovážné poloze (a) je gravitační síla mg kompenzována silou působící na m od pružiny. Výchylky z rovnovážné polohy jsou jen tak velké, aby při protažení (b) i stlačení (c) platil pro deformaci pružiny Hookův zákon.

Vydělíme-li pohybovou rovnici m a označíme

$$\frac{k}{m} = \omega^2 , \qquad (3)$$

dostaneme obyčejnou lineární diferenciální rovnici 2.řádu pro funkci $x = x(t)$ (tj. pro závislost výchylky na čase)

$$\boxed{\frac{d^2x(t)}{dt^2} + \omega^2\, x(t) = 0} \qquad (4a)$$

Její obecné řešení lze psát v některém z následujících (ekvivalentních) tvarů:

$$x(t) = A_1 \sin \omega t + A_2 \cos \omega t \qquad (5a)$$

nebo

$$x(t) = B \sin(\omega t + \varphi) \qquad (5b)$$

nebo

$$x(t) = C_1 \exp(i\omega t) + C_2 \exp(-i\omega t) \qquad (5c)$$

K určení dvojice konstant - A_1, A_2 nebo B, φ nebo C_1, C_2 - je třeba znát počáteční podmínky, tj. polohu a rychlost částice v nějakém určitém čase;

zvolíme-li, tak jak je to obvyklé, t=0, musíme znát

$$\boxed{x(0) = x_0 \quad , \quad \left.\frac{dx}{dt}\right|_{t=0} = v_0} \tag{4b}$$

Z rovnic (5) je zřejmé, že pohyb částice je periodický s periodou T, která s kruhovou frekvencí ω souvisí vztahem $\omega = 2\pi/T$. Každý oscilátor má svou vlastní frekvenci ω, určenou vztahem (3), tzn. konstantou k charakterizující přitažlivou sílu (v obr.2 charakterizuje k "tuhost" pružiny) a hmotností m. Podstatným závěrem následujícího odstavce je zjištění, že vlastní frekvence harmonického oscilátoru je shodná pro klasické i kvantověmechanické řešení. To nám umožňuje řešit úlohy v nichž jde jen o stanovení vlastních frekvencí (např. kmity molekul, krystalové mříže apod) jednoduššími postupy klasické mechaniky, i když se jedná o soustavy mikročástic.

1.2) Kvantověmechanický hamiltonián

K napsání hamiltoniánu potřebujeme znát potenciální energii V(x), která je definovaná jako práce potřebná k přenesení částice z rovnovážné polohy 0 (počátek souřadnic) do místa se souřadnicí x. Práce vnějších sil nutná k infinitesimálnímu vychýlení částice z místa ξ do místa se souřadnicí $\xi + d\xi$ je $k\xi d\xi$ ($-k\xi$ je síla působící v místě se souřadnicí ξ na částici směrem k 0, vnější síla musí působit proti této síle a je tedy $+k\xi$); celková práce pro posun z 0 do x je

$$V(x) = \int_0^x k\xi \, d\xi = \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \tag{6}$$

Klasický hamiltonián pro jednorozměrný harmonický oscilátor je součtem kinetické energie a V(x) :

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \tag{7}$$

Kvantověmechanický hamiltonián $\hat{H}$ dostaneme z (7) náhradou p a x odpovídajícími operátory $\hat{p}$, $\hat{x}$ (podle 7.postulátu, v I.dílu str.110)

$$\boxed{\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2} \tag{8a}$$

přičemž operátory $\hat{p}$, $\hat{x}$ splňují komutační relaci

$$\boxed{[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar} \tag{8b}$$

Abychom při řešení nemuseli neustále přepisovat nepodstatné konstanty, přejdeme od operátorů $\hat{p}$, $\hat{x}$ k operátorům $\mathcal{P}$, $\mathcal{X}$ transformací

$$\mathcal{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\ \hat{x} \quad , \quad \mathcal{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\ \hat{p} \tag{9a}$$

Položíme-li ještě

$$\hat{H} = \hbar\omega\,\mathcal{H} \tag{9b}$$

bude

$$\boxed{\mathcal{H} = \frac{1}{2}\left(\mathcal{P}^2 + \mathcal{X}^2\right)} \tag{10a}$$

a k tomu komutátor

$$\boxed{[\mathcal{X}, \mathcal{P}] = i} \tag{10b}$$

Naším úkolem nyní je, nalézt vlastní hodnoty ε a vlastní vektory $|\varphi\rangle$ hamiltoniánu $\mathcal{H}$, tzn. řešit Schrödingerovu rovnici

$$\mathcal{H}|\varphi\rangle = \varepsilon|\varphi\rangle \tag{11}$$

V terminologii potenciálových jam z kap.III jde o nalezení možných stavů částice v parabolické potenciálové jámě, neboť $V(x) \sim x^2$.

2. Schrödingerova rovnice pro harmonický oscilátor

2.1) Řešení v souřadnicové reprezentaci

Hamiltonián (10a) převedeme do souřadnicové reprezentace tak (viz kap.IV,odst.3), že za operátor souřadnice $\mathcal{X}$ vezmeme přímo proměnnou X. Diferenciální operátor pro $\mathcal{P}$ musí vyhovovat (10b). Pro původní impuls $\hat{p}$ z (8) by bylo $\hat{p} = -i\hbar\,(\partial/\partial x)$, pro transformovaný impuls $\mathcal{P}$ je

$$\mathcal{P} = -i\,\frac{d}{dX} \tag{12}$$

Schrödingerova rovnice (11) má v této reprezentaci tvar

$$\frac{1}{2}\left(-\frac{d^2}{dX^2} + X^2\right)\varphi(X) = \varepsilon\,\varphi(X) \tag{13a}$$

nebo po úpravě

$$\boxed{\frac{d^2\varphi(X)}{dX^2} + (2\varepsilon - X^2)\,\varphi(X) = 0} \tag{13b}$$

Vlastní vektory $|\varphi\rangle$ jsou nyní reprezentovány vlnovými funkcemi $\varphi(X)$.

Řešení této diferenciální rovnice není již tak snadné, jako tomu bylo např. u rovnic z kap.III. Nejde totiž o diferenciální rovnici s konstantními koeficienty. Protože základní myšlenky řešení se využívají i při jiných úlohách, provedeme ho zde podrobněji.