CURSUL 9

OSCILATORUL LINIAR ARMONIC CUANTIC

Vom aborda în continuare o nouă formă de mişcare unidimensională, ***mişcarea oscilatorie armonică*** adică mişcarea unui punct material $\boldsymbol{m}$ atras de un punct fix $\boldsymbol{0}$ ales ca origine a axelor, cu o forță proporțională cu distanțarea instantanee a celor două puncte $\boldsymbol{x}$ numită ***elongație*** , $F(x) = -m\omega^2 x$. Energia potențială a sistemului este în acest caz, $U(x) = -\int_a^x F(x)dx = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ astfel că se poate scrie *expresia hamiltonianului în virtutea prinicipiului de corespondență*,

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2 . \tag{9.1}$$

- Sub aspect clasic *oscilatorul liniar armonic poate lua orice valori cuprinse* între *min U(x)* şi *infinit*, adică $0 \le E < \infty$.

- Sub aspect cuantic va trebui să rezolvă ecuația cu valori proprii a hamiltonia - nului scrisă explicit sub forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dx^2} + \frac{k}{2}x^2u = Eu \ ; \qquad k = m\omega^2 \tag{9.2}$$

1.Metoda polinomială

Această expresie se simplifică considerabil dacă *se face schimbarea de variabilă* $\xi = \alpha x$ în baza căreia, găsim:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2\alpha^2} - \frac{km}{\hbar^2\alpha^4}\xi^2\right)u = 0 \tag{9.3}$$

Alegem $\alpha = \sqrt[4]{\frac{km}{\hbar^2}}$ şi notăm

$$\lambda \equiv \frac{2mE}{\hbar^2 \alpha^2} = \frac{2E}{\hbar \omega} \tag{9.4}$$

astfel că ecuaţia se va scrie acum sub o formă simplă:

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} + \left(\lambda - \xi^2\right) u = 0 \tag{9.5}$$

Studiem ***comportarea asimptotică*** a acestei ecuaţii. Pentru $\xi \to \pm\infty$, $|\xi| \to \infty$ şi ecuaţia capătă o nouă formă, ***forma asimptotică***

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} - \xi^2 u = 0 \tag{9.6}$$

care admite *soluţiile particulare*

$$u(\xi) = e^{\pm \frac{1}{2}\xi^2} \tag{9.7}$$

Într-adevăr, derivând această expresie în raport cu ξ, obţinem

$$\frac{du}{d\xi} \equiv u'(\xi) = \pm \xi e^{\pm \frac{1}{2}\xi^2}$$

$$\frac{d^2 u}{d\xi^2} \equiv u''(\xi) = \xi^2 e^{\pm \frac{1}{2}\xi^2}$$

Cu aceste expresii se verifică (9.6) ceea ce ne permite să considerăm că soluţia generală a ecuaţiei asimptotice va rezulta ca o combinaţie liniară a funcţiilor (9.7).

$$u(\xi) = C_+ e^{\frac{1}{2}\xi^2} + C_- e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{9.8}$$

în care C_+ *şi* C_- *sunt două funcţii lent variabile în timp, aproape constante.* Distingem două variante:

a) $C_+ \neq 0$, când $u(\xi)$ se comportă pentru $|\xi| \to \infty$ ca $e^{\frac{1}{2}\xi^2}$

b) $C_+ = 0$,când $u(\xi)$ se comportă asimptotic ca $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$

Prima variantă nu convine întrucât $u(\xi)$ nu ar avea o comportare asimptotică corectă în sensul că pentru $|\xi| \to \infty$, $u(\xi)$ ar tinde la infinit.

Acceptăm varianta b) şi *vom considera că*

$$u(\xi) = H(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \tag{9.9}$$

Introducem această expresie în (9.5) şi obţinem o ecuaţie diferenţială liniară de ordinul al doilea *cu coeficienţii variabili*

$$H'' - 2\xi H' + (\lambda - 1)H = 0 \tag{9.10}$$

*căreia îi aplicăm **teorema de existenţă a soluţiilor*** . Aceasta afirmă că *orice soluţie a acestei ecuaţii poate fi scrisă sub forma unei serii de puteri convergentă în tot planul (cu rază de convergenţă infinită)*. Scriem deci

$$H(\xi) = \xi^s \left(a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2 + \dots\right) = \xi^s \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \quad cu \;\; s \geq 0 \;\; şi \;\; a_0 \neq 0$$

Introducem această dezvoltare pentru $H(\xi)$ în ecuaţia (9.10) şi obţinem

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_k (k+s)(k+s-1)\xi^{k+s-2} = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \left[2(k+s) + 1 - \lambda\right]\xi^{k+s}$$

Egalitatea presupune egalarea coeficienţilor seriilor din ambii membri pentru fie - care putere în parte. Rezultă

$$\text{i) } a_0 s(s-1) = 0$$

$$\text{ii) } a_1(a+s)s = 0$$

$$\text{iii) } a_{\nu+2}(\nu+s+2)(\nu+s+1) = a_\nu\left[2(\nu+s) + 1 - \lambda\right] \tag{9.11}$$

Ultima relaţie reprezintă *o relaţie de recurenţă între coeficienţi*

$$\frac{a_{\nu+2}}{a_\nu} = \frac{2(\nu+s) + 1 - \lambda}{(\nu+s+2)(\nu+s+1)} \tag{9.12}$$

din care putem exprima coeficienţii cu indice par cunoscând a_0 şi pe aceia cu indice impar dacă se cunoaşte a_1.

În consecință, seria de puteri $H(\xi)$ se regrupează în două serii: una $H_1(\xi)$

în care ν va fi ***par***,

$$H_1(\xi)=\xi^s\left(a_0+a_2\xi^2+a_4\xi^4+...\right)=\xi^s\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu\xi^\nu \quad cu\ \nu-par$$

şi o serie notată cu $H_2(\xi)$ în care ν va fi ***impar***:

$$H_2(\xi)=\xi^s\left(a_1+a_3\xi^3+...\right)=\xi^s\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu\xi^\nu \quad cu\ \nu-impar$$

Rezultă că analiza comportării asimptotice a seriei H presupune analiza comportă - rilor asimptotice ale seriilor H_1 şi H_2.

Comportarea asimptotică a unei serii de puteri e definită de termenii din serie cu puteri superioare şi nu se modifică dacă se adaugă sau se elimină un polinom.

Vom adopta **simbolul ~** *pentru a desemna comportarea asimptotică* şi îl vom citi " ***se comportă asimptotic ca*** ". În virtutea celor afirmate şi a convenției asupra simbolului ~ , scriem:

$$H_1(\xi)\sim a_0\xi^s\sum_{\nu=N}^{\infty}\left[\frac{a_{\nu+2}}{a_\nu}=\frac{2\nu}{\nu(\nu+2)}\right]\sim a_0\xi^s\sum_{\nu=N}^{\infty}\left[\frac{a_{\nu+2}}{a_\nu}=\frac{2}{\nu+2}\right] \qquad (9.13)$$

Observând că

$$e^{\xi^2}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\xi^2\right)^n}{n!}=\sum_{\nu=0}^{\infty}a_\nu\xi^\nu \qquad (9.14)$$

rezultă $\nu=2n$ şi $a_\nu=\frac{1}{n!}$. Obținem $\frac{a_{\nu+2}}{a_\nu}=\frac{\left(\frac{\nu}{2}\right)!}{\left(\frac{\nu+2}{2}\right)!}=\frac{1}{\frac{\nu}{2}+1}=\frac{2}{\nu+2}$ astfel că

$H_1(\xi)\sim a_0\xi^s e^{\xi^2}$.

Analog, se constată că $H_2(\xi)\sim a_1\xi^{s+1}e^{\xi^2}$

În concluzie $H(\xi)\sim(a_0+a_1\xi)\xi^s e^{\xi^2}$ .Am stabilit aşadar că $u(\xi)\sim e^{\frac{\xi^2}{2}}$ *tin - zând la* ∞ *pentru* $|\xi|\to\infty$. Pentru a asigura mărginirea funcțiilor $u(\xi)$ va trebui să întrerupem seria $H(\xi)$ la un polinom pentru ca $H(\xi)\not\sim e^{+\xi^2}$ scriere ce se citeşte "$H(\xi)$ ***nu se comportă asimptotic ca*** e^{ξ^2} **"**.

Considerăm mai întâi seria $H_1(\xi)$. Prin ipoteză $a_0\neq 0$, rezultând toți coeficienții cu indicii pari diferiți de zero. Vom impune condiția ca *ultimul coefici - ent cu indice par diferit de zero să fie* a_ν*, restul în număr infinit să se anuleze:*

$$a_{\nu+2}=a_{\nu+4}=\dots=0$$

Acesta însemnă să impunem ***condiția de întrerupere a seriei*** : $2(\nu+s)+1-\lambda=0$

Notăm $\nu+s=n$ şi rezultă $\lambda=2n+1=\frac{2E}{\hbar\omega}$. Constatăm că *energia oscilatorului manifestă o cuantificare după **n**:*

$$E_n=\frac{\hbar\omega}{2}(2n+1)=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{9.15}$$

- În baza relației (9.11) rezultă ***s=0*** sau ***s=1*** deci ***n*** poate lua valorile ν şi $\nu+1$ în orice caz *valori întregi nenegative*. Valoarea ***s=1*** ne permite să observăm din (9.12) că putem lua $a_1=0$ *rezultând astfel toți coeficienții cu indice impar, nuli*. Aceasta înseamnă că va trebui să luăm *întreaga serie* $H_2(\xi)$ *nulă*, obținând în definitiv *forma finală a polinoamelor* $H(\xi)$*:*

$$H(\xi)=\xi^s\left(a_0+a_2\xi^2+a_4\xi^4+\dots+a_\nu\xi^\nu\right) \tag{9.16}$$

Aceste polinoame au o serie de ***proprietăți*** care se răsfrâng asupra funcțiilor proprii $u(\xi)$. Astfel,

- gradul acestor polinoame este $n=\nu+s$;
- sunt dotate cu paritate şi au paritatea lui ***n***;

Cum $H(\xi)$ *este pară în* ξ şi paranteza de asemenea, *rezultă pentru **s=0** o valoare pară pentru **n***, iar *pentru **s=1**, o valoare impară* ceea ce ne permite să observăm, că

$$H_n(-\xi)=(-1)^n H_n(\xi) \qquad (9.17)$$

n fiind gradul polinomului.

- în baza relațiilor (9.15) şi ținând seama că $\lambda = 2n + 1$ observăm că

- polinoamele $H(\xi)$ satisfac ecuația

$$H''-2\xi H'+2nH = 0 \qquad (9.18)$$

Recunoaştem în această ecuație, *ecuația Hermite* ale cărei soluții sunt *polinoamele Hermite de ordinul **n*** care se prezintă sub forma

$$H_n(\xi)=(-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right); n = 0,1,2,... \qquad (9.19)$$

stabilită de *funcția generatoare*

$$e^{-s^2+2\xi s} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)s^n}{n!} \qquad (9.20)$$

- unui ***n*** dat îi corespunde un singur polinom liniar independent.

Vom scrie acum *expresia finală a funcțiilor proprii ale operatorului hamiltonian pentru oscilatorul liniar armonic cuantic*

$$u_n(\xi)= N_n H_n(\xi)e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \qquad (9.21)$$

în care N_n este *o constantă de normare* iar H_n *polinoamele Hermite de ordinul **n***.

- polinoamele $H_n(\xi)$ tind către ξ^n pentru $|\xi| \to \infty$.

Aceste proprietăți ale polinoamelor Hermite induc ***proprietăți funcțiilor proprii*** $u_n(\xi)$ definite prin (9.21),

- funcțiile $u_n(\xi)$ sunt dotate cu paritate şi au paritatea lui ***n***:

$$u_n(-\xi)=(-1)^n u_n(\xi) \qquad (9.22)$$

- se comportă asimptotic corect : $u_n(\xi) \underset{|\xi|\to\infty}{\sim} \xi^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \underset{|\xi|\to\infty}{\longrightarrow} 0$.

- unui n dat îi corespunde o singură valoare proprie liniar independentă şi o singură valoare proprie E_n.

Constatăm aşadar că *valorile proprii ale energiei oscilatorului liniar armonic cuantic sunt nedegenerate.*

- sistemul de funcții proprii ale energiei este normat şi complet.

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_m(\xi) u_n^*(\xi) d\xi = \delta_{nm}$$

- constanta de normare N_n se determină impunând funcțiilor proprii (9.20) condiția de normare cu schimbarea de variabilă $\xi = \alpha x$ pentru a folosi proprietățile de ortogonalitate ale polinoamelor Hermite. Obținem relația echivalentă condiției de normare:

$$\frac{|N_n|^2}{|\alpha|^2} \int |H_n(\xi)|^2 e^{-\xi^2} d\xi = 1 \tag{9.23}$$

Folosim funcțiile generatoare ale polinoamelor Hermite (9.20) şi obținem:

$$e^{-\xi^2} \cdot e^{-s^2+2\xi s} \cdot e^{-t^2+2\xi t} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{s^k t^j}{k!\, j!} e^{-\xi^2} H_k(\xi) H_j(\xi)$$

sau integrând în ambii membrii,

$$e^{-s^2-t^2} \int e^{-\xi^2+2\xi(t+s)} d\xi = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{s^k t^j}{k!\, j!} \int e^{-\xi^2} H_k H_j d\xi \tag{9.24}$$

Observăm că $\xi^2 - 2\xi(t+s) = [\xi - (t+s)]^2 - t^2 - s^2 + 2ts$ şi introducem *o nouă schimbare de variabilă* $\beta \equiv \xi - (t+s)$,apoi notăm $I_{kj} \equiv \int e^{-\xi^2} H_k H_j d\xi$.

Obținem $d\beta = d\xi$ şi (3.84) devine: $e^{ts}\sqrt{\pi} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{s^k t^j}{k!\, j!} I_{kj}$

din care, deducem

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{2^k t^k s^k}{k!}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\sum_{k=0}^{\infty}\sum_{j=0}^{\infty}\frac{s^k t^j}{k!\,j!}I_{kj}$$

Cum $I_{kj}=0$ pentru $k\neq j$ în baza condiției de normare a polinoamelor Hermite,

rezultă $\frac{2k}{k!}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{I_{kk}}{(k!)^2}$.

Găsim $I_{nn}=\int H_n^2 e^{-\xi^2}d\xi=2^n n!\sqrt{\pi}$ şi în baza relației (9.20) se obține

$$N_n=\left(\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} \tag{9.25}$$

Rezultă *expresia finală pentru funcția proprie* $u_n(\xi)$ *a hamiltonianei oscilatorului liniar armonic cuantic* reunind relațiile (9.19), (9.20) şi (9.25).

$$u_n(\xi)=(-1)^n\left(\frac{\alpha}{2^n n!\sqrt{\pi}}\right)^{1/2}e^{\xi^2/2}\frac{d^n}{d'\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right) \tag{9.26}$$

2.*Metoda operatorilor ridicător şi coborâtor*

Ecuațiile canonice de mişcare $\dot{x}=\frac{p}{m}$ şi $\dot{p}=-m\omega^2 x$ permit scrierea sub o formă mai simplă a hamiltonienei (9.4) dacă *se introduce variabila*

$$C\equiv x+i\frac{p}{m\omega} \tag{9.27}$$

şi conjugata complexă a acesteia $C^*\equiv x-i\frac{p}{m\omega}$.

Se obțin noi expresii în variabilele C şi C^* ce vor conține ecuațiile (9.4) în mod implicit:

$$\dot{C}=-i\omega C \quad ; \qquad C^*=i\omega C^* \tag{9.28}$$

Diferența este că – spre deosebire de ecuațiile (9.26) care conțin în aceeaşi ecuație ambele variabile $\boldsymbol{p}$ şi $\boldsymbol{x}$ – ecuațiile (9.28) se scriu în aceeaşi variabilă $\boldsymbol{C}$, respectiv $\boldsymbol{C^*}$ iar hamiltoniana (9.4) capătă forma simplificată

$$\hat{H} = \frac{m\omega^2}{2} CC^* = \frac{m\omega^2}{2} C^* C \tag{9.29}$$

Introducem – prin analogie – în baza acestor observații, operatorii

$$\hat{C} \equiv \hat{x} + i\frac{\hat{p}}{m\omega} \quad ; \quad \hat{C}^+ \equiv \hat{x} - i\frac{\hat{p}}{m\omega} \tag{9.30}$$

şi observăm că *aceşti operatori nu sunt hermitici însă sunt reciproc adjuncți*.

Se obțin relațiile

$$\hat{H} = \frac{m\omega^2}{4}\left(\hat{C}\hat{C}^+ + \hat{C}^+\hat{C}\right) \tag{9.31}$$

$$\hat{C}\hat{C}^+ - \hat{C}^+\hat{C} = \frac{2\hbar}{m\omega}\cdot\hat{I} \tag{9.32}$$

pe care le vom scrie cu ajutorul altor doi operatori

– *operatorul* ***coborâtor*** $\hat{a} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{C}$ şi

– *operatorul* ***ridicător*** $\hat{a}^+ \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{C}^+$

Obținem astfel relațiile:

$$\hat{a}\hat{a}^+ - \hat{a}^+\hat{a} = \left[\hat{a}, \hat{a}^+\right] = \hat{I} \tag{9.33}$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}\right) \tag{9.34}$$

Relația (9.33) ne permite să observăm că dacă notăm cu λ şi ψ_λ *valoarea proprie*, respectiv *funcția proprie* a operatorului produs $\hat{a}^+\hat{a}$

$$\hat{a}^+\hat{a}\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda \tag{9.35}$$

rezultă că ψ_λ *va fi funcție proprie a operatorului* $\hat{a}\hat{a}^+$ *cu valoarea proprie* $\lambda + 1$, în plus

$$\hat{H}\psi_\lambda = \frac{\hbar\omega}{2}(2\lambda + 1)\psi_\lambda = \hbar\omega\left(\lambda + \frac{1}{2}\right)\psi_\lambda \qquad (9.36)$$

Avem de asemenea,

$$\|a\psi_\lambda\|^2 =< \hat{a} \,|\, \hat{a}\psi_\lambda >=< \psi_\lambda, \hat{a}^+\hat{a}\psi_\lambda >= \lambda < \psi_\lambda \,|\, \psi_\lambda > \geq 0$$

şi cum ψ_λ nu se poate anula identic, rezultă $\|a\psi_\lambda\| > 0$ Pe de altă parte $< \psi_\lambda \,|\, \psi_\lambda >= \|\psi_\lambda\|^2 > 0$. Se desprinde astfel concluzia că *valorile proprii* λ *ale operatorului* $\hat{a}^+\hat{a}$ *nu pot fi negative.*

Aplicăm acestui operator operatorul $\hat{a}$

$$(\hat{a}\hat{a}^+)\hat{a}\psi_\lambda = (\hat{a}^+\hat{a} + \hat{I})\hat{a}\psi_\lambda = \lambda\,\hat{a}\psi_\lambda \qquad (9.37)$$

Ultima egalitate se scrie

$$\hat{a}^+\hat{a}(\hat{a}\psi_\lambda) = (\lambda - 1)(\hat{a}\psi_\lambda) \qquad (9.38)$$

şi arată că funcţia $\hat{a}\psi_\lambda$ este *fie funcţie proprie a operatorului* $\hat{a}^+\hat{a}$ *cu valoarea proprie* $\lambda - 1$ *fie este nulă*. Acest ultim caz este însă trivial şi îl vom abandona admiţând primul caz. Aplicând încă odată operatorul $\hat{a}$ funcţiei $\hat{a}\psi_\lambda$, vom obţine *fie că funcţia* $\hat{a}^2\psi_\lambda$ *este funcţie proprie a acestui operator, corespunzând valorii proprii* $\lambda - 2$*, fie că este o funcţie nulă*. Procedeul continuă astfel că după n operaţii, valoarea proprie $\lambda - n$ a operatorului $\hat{a}^+\hat{a}$ ar precede a $n+1$ – *a* operaţie în urma căreia s-ar obţine pentru prima oară o valoare proprie $\lambda - (n + 1)$, negativă.Şi cum *această posibilitate este exclusă* rezultă că s-a ajuns după n paşi la o funcţie proprie $\hat{a}^n\psi_{\lambda_0}$ a operatorului $\hat{a}^+\hat{a}$ *care nu poate fi decât nulă*.

$$\hat{a}^+\hat{a}\left(a^{n-1}\psi_{\lambda_0}\right) = \hat{a}^+\left(a^m\psi_{\lambda_0}\right) = \lambda_0\psi_{\lambda_0} = (\lambda - n)\psi_{\lambda_0}$$

şi cum $\psi_{\lambda_0} \neq 0$, rezultă $\lambda_0 = \lambda - n = 0$ ceea ce arată că *valoarea proprie* λ *este egală cu numărul* n *întreg şi pozitiv sau nul*. Prin compararea ecuaţiei cu valori proprii a energiei $H\psi_n = E_n\psi_n$ cu ecuaţia (9.36) şi ţinând seama că $\lambda_n \equiv n$

($n=0,1,2,...$) se obțin valorile proprii E_n ale energiei oscilatorului în stările sale proprii:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \qquad n = 0,1,2,... \tag{9.39}$$

Observăm că *aceste valori proprii definesc un spectru discret*.

Funcțiile proprii ψ_n corespunzând valorilor proprii E_n ale energiei sunt normate şi în virtutea raționamentului expus, se constată că

$$\hat{a}\psi_n = \alpha_n \psi_{n-1} \tag{9.40}$$

α_n *fiind o constantă a cărei valoare o vom obține din condiția de normare*. Această ecuație este echivalentă cu

$$\hat{a}^+\hat{a}\psi_n = n\psi_n = \alpha_n \hat{a}^+\psi_{n-1} = \hat{a}^+(\alpha_n\psi_{n-1})$$

din care se obține

$$\hat{a}^+\psi_{n-1} = \frac{n}{\alpha_n}\psi_n \tag{9.41}$$

Relațiile de recurență (9.40) şi (9.41) motivează denumirile de *coborâtor* pentru operatorul $\hat{a}$ şi respectiv *ridicător* pentru $\hat{a}^+$ şi folosesc la calculul valorilor constantei de normare. Într-adevăr, având în vedere aceste relații, în baza egalității $<\psi_{n-1}|\hat{a}\psi_n> = <\hat{a}^+\psi_{n-1}|\psi_n>$ se obține:

$$\alpha_n <\psi_{n-1}|\psi_{n-1}> = \frac{n}{\alpha_n^*}<\psi_n|\psi_n>$$

echivalentă cu $|\alpha_n|^2 = n$ care admite soluția $\alpha_n = \sqrt{n}e^{i\varphi}$. *Factorul de fază* $e^{i\varphi}$ *este arbitrar* astfel că se poate considera $\varphi = 0$. Rezultă $\alpha_n = \sqrt{n}$ şi *introducând o nouă variabilă* $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ obținem expresiile operatorilor $\hat{a}$ şi $\hat{a}^+$ *ca funcții de* ξ:

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) \quad ; \qquad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) \tag{9.42}$$

Relația (9.40) scrisă pentru $n=0$, $\hat{a}\psi_0 = 0$ conduce la ecuația $\xi\psi_0 - \frac{d\psi_0}{d\xi} = 0$ şi admite soluția normată: $\psi_0 = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{\xi^2}{2}}$. Funcția ψ_n se va obține aplicând succesiv de n ori relația de recurență (9.41).

Se obține

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\hat{a}^+\right)^n \psi_0 = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\cdot 2^n \cdot n!}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}} \qquad (9.43)$$

şi folosind identitatea $\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right) e^{\frac{\xi^2}{2}} \cdot F(\xi) = -e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{dF(\xi)}{d\xi}$ în care $F(\xi)$ este o funcție arbitrară de ξ, putem scrie *expresia funcției proprii* ψ_n a hamiltonianei oscilatorului liniar armonic cuantic:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\cdot 2^n \cdot n!}}(-1)^n e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n} \qquad (9.44)$$

Se observă că expresiile (9.26) şi (9.44) stabilite prin două metode diferite sunt identice. Particularizăm (9.44) pentru numere cuantice n mici: $n=0,1$ *şi* 2. Se obțin funcțiile proprii ψ_n şi valorile proprii E_n corespunzând acestor stări:

$$\psi_0 = N_0 \exp\left(\frac{-\xi^2}{2}\right) \quad ; \quad E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

$$\psi_1 = N_1\left[\exp\left(\frac{-\xi^2}{2}\right)\right]\cdot 2\xi \quad ; \quad E_1 = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

$$\psi_2 = N_2\left[\exp\left(\frac{-\xi^2}{2}\right)\right]\cdot\left(4\xi^2 - 2\right) \quad ; \quad E_2 = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

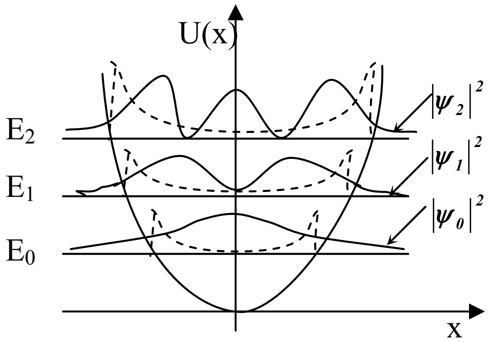

Figura 3.8

În figura 3.8 prezentăm prin linie punctată dependența de elongație a densităților de probabilitate de localizare a oscilatorului clasic iar prin curbă continuă densitățile de probabilitate cuantice pentru stările ce corespund energiilor E_0, E_1 şi E_2. Parabola prezintă graficul funcției $U(x) = \frac{kx^2}{2}$.

Semnalăm câteva observații:

♦ Expresia (9.35) evidențiază din punct de vedere cuantic o energie a oscilatorului în starea fundamentală $n=0$, *diferită de zero* spre deosebire de oscilatorul clasic *pentru care energia minimă este nulă*. Din punct de vedere clasic, viteza oscilatorului este maximă în poziția de echilibru, iar densitatea de probabilitate de localizare fiind invers proporțională cu viteza, va admite în această poziție un minim, în timp ce teoria cuantică evidențiază pentru oscilatorul liniar armonic cuantic o densitate de probabilitate de localizare $|\xi_0|^2$ maximă în această poziție. În sfârşit, în timp ce oscilatorul clasic se poate mişca între limitele $-A$ şi A, oscilatorul cuantic se poate afla oriunde pe direcția suport a mişcării sale.

Valorile medii ale poziției x şi ale impulsului p_x sunt nule în orice stare

$$\bar{x} = \int_{\infty} \psi^* x \psi dx = 0$$

$$\bar{p}_x = -i\hbar \int_{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = 0$$

deoarece funcția de undă ψ_n este pară.

♦ *Abaterile pătratice medii nu sunt nule nici în starea fundamentală.*

Într-adevăr, în baza relațiilor (9.30) obținem

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a} + \hat{a}^{+}\right) \tag{9.45}$$

$$\hat{p} = -i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\hat{a} - \hat{a}^{+}\right) \tag{9.46}$$

Folosind relațiile (9.40) rezultă ecuațiile

$$\hat{a}^{2}\psi_n = \sqrt{n(n-1)}\,\psi_{n-2} \tag{9.47}$$

$$\hat{a}^{+2}\psi_n = \sqrt{(n+1)(n+2)}\,\psi_{n+2} \tag{9.48}$$

Ținând seama de acestea se calculează ***abaterile pătratice medii***. Găsim ast - fel expresiile: $\Delta x = \sqrt{\overline{x^2} - \left(\overline{x}\right)^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{2n+1}$; $\Delta p = \sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}}\sqrt{2n+1}$ şi în baza egalităților $\left(\hat{a}\hat{a}^{+} + \hat{a}^{+}\hat{a}\right)\psi_n = \frac{2}{\hbar\omega}\hat{H}\psi_n = \frac{2}{\hbar\omega}E_n\psi_n = \frac{2}{\hbar\omega}(2n+1)\psi_n$ obținem, $\Delta x \cdot \Delta p = \frac{\hbar}{2}(2n+1) \geq \frac{\hbar}{2}$.

♦ *Energia potențială medie* va fi $\overline{U_n} = \frac{m\omega^2}{2}\overline{x^2} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n + \frac{1}{2}\right)$

iar *energia cinetică medie* va rezulta la aceeaşi valoare

$$\overline{E}_{cn} = \frac{\overline{p^2}}{2m} = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Se observă că $\overline{U_n} = \overline{E}_{cn} = \frac{1}{2}E_n$.