ΑΡΜΟΝΙΚΟΣ ΤΑΛΑΝΤΩΤΗΣ

Φυσικά παραδείγματα ἁρμονικοῦ ταλαντωτοῦ: μάζα σέ προσδεδεμένη σέ ἐλατήριο, δονούμενο διατομικό μόριο, ἄτομο συνδεδεμένο σέ μεγάλη μοριακή μάζα, ἠλεκτρομαγνητικό πεδίο τό ὁποῖο μπορεῖ νά θεωρηθῇ ὡς ἄθροισμα ἁρμονικῶν ταλαντωτῶν, κ.τ.λ.

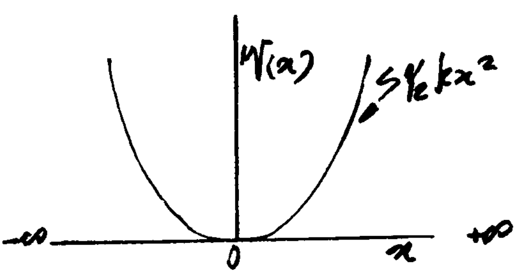
Ἡ δύναμις ἐπαναφορᾶς στόν ἁρμονικό ταλαντωτή εἶναι

$F_x = -kx$ ὅπου k σταθερά. Ἄρα ἡ δυναμική ἐνέργεια τοῦ συστήματος $V(x)$ εἶναι

$$V(x) = \int_0^x kx'dx' = \tfrac{1}{2}kx^2 \qquad (1)$$

(Προφανῶς $F_x = -\frac{\partial V}{\partial x}$)

Ἡ δυναμική ἐνέργεια (1) εἶναι αὐτή ἡ ὁποία καθορίζει τό σύστημα ὡς ἁρμονικό ταλαντωτή.



Σχ. 1. Καμπύλη δυναμικῆς ἐνεργείας ἁρμονικοῦ ταλαντωτοῦ

Ἡ διαφορά μεταξύ τοῦ δυναμικοῦ τοῦ ἁρμονικοῦ ταλαντωτοῦ καί τοῦ ἀντιστοίχου δυναμικοῦ τοῦ φρέατος ἀπείρων τοιχωμάτων

εἶναι ἡ ταχύτης μέ τήν ὁποία αὐξάνει τό δεύτερο καί ἡ ὁποία βέβαια εἶναι πολύ μεγαλύτερη. Κατά τ' ἄλλα τά δύο δυναμικά εἶναι ποιοτικῶς ἴδια.
Ἡ Χαμιλτωνιανή τοῦ συστήματος εἶναι

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 \qquad (2)$$

ἄρα ἡ ἐξίσωσις Schrödinger εἶναι

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\Psi(x) = E\Psi(x) \qquad (3)$$

Ἡ (3) μπορεῖ να λυθῆ εἴτε μέ τήν "κλασσική" τεχνική ἐπιλύσεως τῶν ἀντιστοίχων διαφορικῶν ἐξισώσεων (τεχνική δυναμοσειρῶν) ἤ μέ τήν τεχνική τῆς "παραγοντοποιήσεως". Ἐμεῖς δέν θ' ἀσχοληθοῦμε μέ τόν τρόπο λύσεως, θά δώσουμε ἀπ' εὐθείας τίς λύσεις (εἶναι καί ὁ τρόπος αὐτός μία τεχνική!)
Ἡ ἐνέργεια στόν ἁρμονικό ταλαντωτή δίνεται ἀπό τήν σχέση

$$\underline{E_n = (n+1/2)\hbar\omega} \qquad n=0,1,2,\dots \qquad (4)$$

ὅπου ω ἡ "κλασσική" κυκλική συχνότης, $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$, ἐξαρτᾶται δηλ. ἀπό τήν σταθερά "συνδέσεως" k καί τήν μάζα m τοῦ συστήματος. Τό n ὀνομάζεται κβαντικός ἀριθμός καί παίρνει μή ἀρνητικές ἀκέραιες τιμές.
Οἱ ἰδιοσυναρτήσεις ὅμως δέν εἶναι ἡμιτονοειδεῖς ὅπως οἱ συναρτήσεις τοῦ φρέατος δυναμικοῦ ἀπείρων τοιχωμάτων ἀλλά μοιάζουν ἀρκετά μέ αὐτές: Εἶναι συναρτήσεις Gauss πολλαπλασιασμένες μέ πολυωνυμική συνάρτηση ἡ ὁποία καί καθορίζει τά κομβικά σημεῖα (σημεῖα μηδενισμοῦ) τῆς

ἰδιοσυναρτήσεως

$$\psi_n(y) = N_n e^{-y^2/2} H_n(y) \qquad (5)$$

ὅπου

$$y=\sqrt{\beta}\,x\,, \quad \beta = (m\omega/\hbar)^{1/2} \qquad (6)$$

καί N_n παράγων κανονικοποιήσεως

$$N_n = \left\{ \sqrt{\frac{\beta}{\pi}}\,\frac{1}{n!\,2^n} \right\}^{1/2} \qquad (7)$$

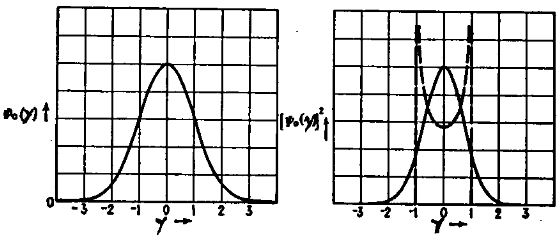
Τά πολυώνυμα $H_n(y)$ εἶναι πολυώνυμα βαθμοῦ n καί καλοῦνται πολυώνυμα Hermite. Ὅταν $n=0$, $H_0(y)=1$ καί ἡ ἰδιοσυνάρτησις $\psi_0(y)$ εἶναι ἁπλῶς ἀνάλογη τοῦ $e^{-y^2/2}$. Δίνουμε τά πρῶτα ἑπτά πολυώνυμα Hermite στόν ἀκόλουθο πίνακα

n	$H_n(y)$
0	1
1	$2y$
2	$4y^2-2$
3	$8y^3-12y$
4	$16y^4-48y^2+12$
5	$32y^5-160y^3+120y$
6	$64y^6-480y^4+720y^2-120$
$\vdots$	$\vdots$

Οἱ ἰδιοσυναρτήσεις $\{\psi_n(y)\}_n$ εἶναι ὀρθοκανονικές. Κανονικοποιημένες διότι ἔτσι κατασκευάσθηκαν καί ὀρθογωνικές λόγῳ τῶν γενικοτέρων ἰδιοτήτων τῆς ΚΜ (vide infra)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy\, \varphi_n^*(y)\, \varphi_m(y) = \delta_{nm} \qquad (8)$$

Ἡ ἰδιοσυνάρτησις $\varphi_n(x)$ ἔχει n κομβικὰ σημεῖα ὅσα βέβαια καὶ αἱ ρίζαι τῆς ἐξισώσεως $H_n(y)=0$.
Ἡ γραφικὴ παράστασις τῆς $\varphi_0(y)$ καὶ τῆς ἀντιστοίχου πιθανοτικῆς πυκνότητος $|\varphi_0(y)|^2$ εἶναι



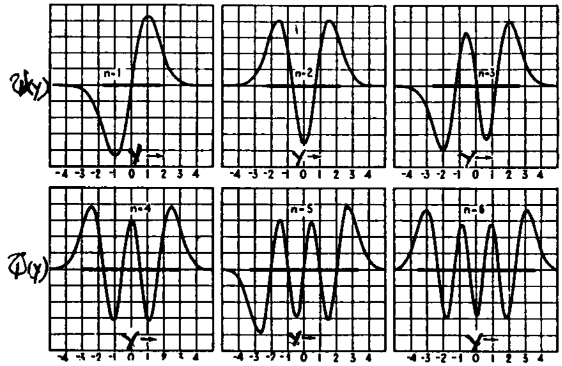
Σχ. 2. Γραφικὴ παράστασις τῆς $\varphi_0(y)$ καὶ $|\varphi_0(y)|^2$.

Οἱ διακεκομμένες κάθετες γραμμὲς τοῦ Σχ. 2β συμβολίζουν τὰ ὅρια δονήσεως τοῦ "κλασσικοῦ" δονητοῦ καὶ ἡ ἐνδιάμεσος διακεκομμένη γραμμὴ τὴν κλασσικὴ κατανομή. Τί ἐννοοῦμε κλασσικὴ κατανομή; Τὸ κλασσικὸ σωματίδιο δονεῖται κατὰ μῆκος τοῦ ἄξονος x μεταξὺ τῶν σημείων <u>ἀναστροφῆς</u>. Ἡ πιθανότης νὰ εὑρεθῇ σὲ κάποιο σημεῖο ἐπὶ τοῦ ἄξονος εἶναι προφανῶς ἀνάλογος τοῦ χρόνου τὸ ὁποῖο δαπανᾷ στὸ διάστημα dx, δηλ. $dx/v(x)$ ὅπου $v(x)$ ἡ ταχύτης στὸ dx. Ἡ ὁλικὴ ἐνέργεια τοῦ ταλαντωτοῦ εἶναι

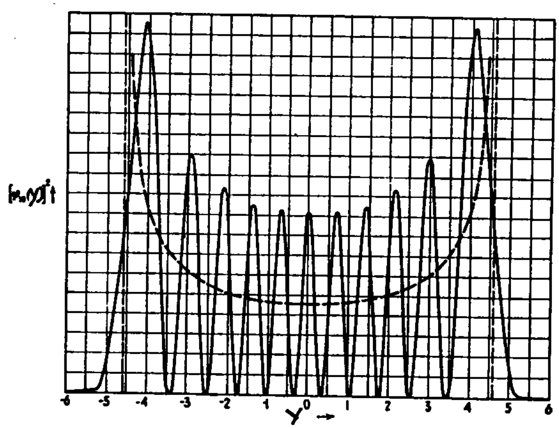
$$E = \frac{mv^2}{2} + \tfrac{1}{2}kx^2$$

$$\Rightarrow v = \left\{ \tfrac{2}{m}\left(E - \tfrac{1}{2}kx^2\right) \right\}^{1/2} \quad \text{μὲ} \quad E = \frac{\hbar\omega}{2} \qquad (9)$$

Θεωρώντας ὡς (κλασσική) συνάρτηση κατανομῆς τήν $dx/v(x)$ βλέπουμε ὅτι ἡ τελευταία ἀπειρίζεται ὅταν $v(x) \to 0$, δηλ. ὅταν $E \to \frac{1}{2} f x^2$, δηλ. στά σημεῖα ἀναστροφῆς, Σχ. 2β.
Τά ἀποτελέσματα τοῦ κβαντικοῦ ταλαντωτοῦ εἶναι διαφορετικά ἀπό ἐκεῖνα τοῦ κλασσικοῦ ταλαντωτοῦ, μέ ριζικές διαφορές στίς χαμηλές ἐνέργειες ἤ στούς μικρούς κβαντικούς ἀριθμούς.
Κλασσικῶς τό σωματίδιο "ξοδεύει" τόν χρόνο του στά ἀκραῖα σημεῖα, διότι ἐκεῖ ἡ ταχύτης του τείνει στό μηδέν, ἐνῶ ἡ $|\psi_0(x)|^2$ ἔχει μέγιστο στό $y=0$, Σχ. 2β (ἐλάχιστο στήν κλασσική κατανομή λόγω μεγίστης ταχύτητος πλησίον τοῦ σημείου αὐτοῦ διότι $V \to 0$). Ἐπί πλέον, στόν κβαντικό ταλαντωτή ὑπάρχει μικρή ἀλλά πεπερασμένη πιθανότης νά εὑρεθῆ τό σωματίδιο <u>ἐκτός</u> κλασσικῆς περιοχῆς. Τό καθαρῶς αὐτό κβαντικό φαινόμενο καλεῖται <u>φαινόμενο σήραγγος</u>.
Στό Σχ. 3 δίνεται ἡ γραφική παράστασις τῶν ἰδιοσυναρτήσεων $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4, \psi_5$ καί ψ_6. Παρατηροῦμε ὅτι ἡ γενική συμπεριφορά τῶν λύσεων εἶναι ταλαντωτική μεταξύ τῶν σημείων ἀναστροφῆς (μεταξύ τῶν σημείων αὐτῶν ὁ ρόλος τοῦ ἐκθετικοῦ παράγοντα $e^{-y^2/2}$ δέν εἶναι σημαντικός) καί φθίνουσα ἐκθετική πέραν τῶν κλασσικῶν σημείων λόγω τῆς αὐξανομένης σημασίας τοῦ ὅρου $e^{-y^2/2}$. Τελικῶς βέβαια ἡ συνάρτησις, καθώς καί ἡ πιθανοτική κατανομή μηδενίζονται στό $y \to \pm\infty$ λόγω ἀκριβῶς τοῦ ὅρου $e^{-y^2/2}$. Στό Σχ. 4 δίνεται ἡ γραφική παράστασις τῆς κατανομῆς $|\psi_{10}(y)|^2$. Ἡ διακεκομμένη γραμμή παριστᾶ τήν κλασσική κατανομή. Παρατηροῦμε, ὅτι ἐνῶ στήν περίπτωση τῆς $|\psi_0(y)|^2$ ἡ κλασσική διαφέρει τελείως ἀπό τήν κβαντική κατανομή (Σχ. 2β), δέν συμβαίνει τό ἴδιο μέ τήν $|\psi_{10}|^2$, μέ τήν αὔξηση δηλ. τοῦ κβαντικοῦ ἀριθμοῦ. Ἡ ὁμοιότης κλασσικῆς-κβαντικῆς συμπεριφορᾶς σέ ὑψηλούς κβαντικούς ἀριθμούς εἶναι γενικώτερο φαινόμενο στό ὁποῖο θά ἀναφερθοῦμε ἀργότερα.



Σχ. 3. Γραφική παράστασις των συναρτήσεων $\psi_1(y) - \psi_6(y)$ του αρμονικού ταλαντωτού.



Σχ. 4 Γραφική παράστασις της $|\psi_{10}(y)|^2$. Η διακεκομμένη γραμμή παριστά, όπως και στο Σχ. 2β, την κλασσική κατανομή.

Συνοψίζομε τά ἀποτελέσματα τοῦ (μονοδιάστατου) ἁρμονικοῦ ταλαντωτοῦ.

(i) $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$, $\omega = (k/m)^{1/2}$. Ἡ σταθερά k ἀφορᾶ τήν "φύση" τοῦ συστήματος. Ἡ ἐνέργεια τοῦ συστήματος εἶναι κβαντισμένη, οἱ δέ στάθμες ἐνεργείας ἰσαπέχουν κατά $\Delta E_n = \hbar\omega$ λόγω τῆς "γραμμικῆς" ἐξαρτήσεως τῆς ἐνεργείας ἐκ τοῦ κβαντικοῦ ἀριθμοῦ n.

Ὑπάρχει ἐνέργεια μηδενός, $E_0 = \hbar\omega/2$. Δηλ. δέν ὑπάρχει τρόπος νά ἀφαιρεθῆ ἐνέργεια ἀπό σύστημα τό ὁποῖο βρίσκεται στήν ἐνέργεια E_0. Ἐπί παραδείγματι ἐάν θεωρήσωμε N μονοδιάστατους μή ἀλληλεπιδρῶντες ἁρμονικούς ταλαντωτές, οἱ ὁποῖοι βρίσκονται στήν ἐνεργειακή στάθμη E_0 ἡ ἐσωτερική ἐνέργεια (θερμοδυναμικῶς μιλῶν) τοῦ συστήματος θά εἶναι $U = \hbar/2 \sum_{j=1} \omega_j$ ἤ $U = N\hbar\omega/2$ ἐάν ἔχουν τήν αὐτή ω. Ἀπό τό σύστημα αὐτό δέν εἶναι δυνατόν ν' ἀφαιρεθῆ ἐνέργεια ἄν ἡ θερμοκρασία τοῦ συστήματος εἶναι $T = 0K$.

Ἐάν $\hbar \to 0$, $E_0 \to 0$ (κλασσικός ταλαντωτής $\to p_x = 0$) ἄρα ἡ ἐνέργεια μηδενός ὀφείλεται στό ὅτι ἡ σταθερά $\hbar$ εἶναι πεπερασμένη καί ὄχι μηδέν. Τό ἴδιο βεβαίως συμβαίνει καί μέ τήν ἐνέργεια $E_N = E_1 N^2$ τοῦ σωματιδίου σέ φρέαρ δυναμικοῦ ἀπείρων τοιχωμάτων.

(ii) Ὅπως τό περιμέναμε ὁ βαθμός ἐκφυλισμοῦ τοῦ προβλήματος εἶναι $g = 1$, διότι τό πρόβλημα εἶναι μονοδιάστατο. Ὑπάρχει δηλ. ἕνα πρός ἕνα ἀντιστοιχία μεταξύ ἐνεργειῶν καί ἰδιοσυναρτήσεων, $E_n \leftrightarrow \Psi_n$.

(iii) Οἱ ἰδιοσυναρτήσεις εἶναι ἐναλλασσομένης συμμετρίας, ἄρτιες γιά $n = 0, 2, 4, 6, \ldots$, περιττές γιά $n = 1, 3, 5, \ldots$. Αὐτό ὅπως θά δοῦμε ὀφείλεται στήν συναρτησιακή μορφή τοῦ V.

Ἁρμονικὸς ταλαντωτὴς σὲ τρεῖς διαστάσεις.

Ἡ ἀντίστοιχος ἐξίσωσις Schrödinger εἶναι

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \tfrac{1}{2}\left(k_x x^2 + k_y y^2 + k_z z^2\right)\right\}\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \qquad (10)$$

Λύνομε τὴν (10) μὲ τὴν μέθοδο διαχωρισμοῦ τῶν μεταβλητῶν x, y, z. Θέτομε

$$\psi(x,y,z) = X(x)\,Y(y)\,Z(z) \qquad (11)$$

Ἀντικαθιστοῦμε τὴν (11) στὴν (10) καὶ παίρνομε τρεῖς ξεχωριστὲς διαφορικὲς ἐξισώσεις ὁλικῶν παραγώγων, οἱ ὁποῖες εἶναι ἴδιες μὲ τοῦ μονοδιάστατου (ἁπλοῦ) ἁρμονικοῦ ταλαντωτοῦ. Ἄρα οἱ ἐπὶ μέρους λύσεις εἶναι

$$\left.\begin{aligned} X(x) &= N_{n_x} e^{-\rho_x^2/2} H_{n_x}(\rho_x) \\ Y(y) &= N_{n_y} e^{-\rho_y^2/2} H_{n_y}(\rho_y) \\ Z(z) &= N_{n_z} e^{-\rho_z^2/2} H_{n_z}(\rho_z) \end{aligned}\right\} \qquad (12)$$

ὅπου $\rho_x = x\sqrt{\beta_x}$, $\rho_y = y\sqrt{\beta_y}$, $\rho_z = z\sqrt{\beta_z}$

καὶ

$$\beta_x = \left(\frac{m\omega_x}{\hbar}\right)^{1/2}, \quad \beta_y = \left(\frac{m\omega_y}{\hbar}\right)^{1/2}, \quad \beta_z = \left(\frac{m\omega_z}{\hbar}\right)^{1/2}$$

$$E = E_x + E_y + E_z = \hbar\left\{(n_x + 1/2)\omega_x + (n_y + 1/2)\omega_y + (n_z + 1/2)\omega_z\right\} \qquad (13)$$

μὲ $n_x, n_y, n_z = 0, 1, 2, 3, \ldots$ ἀνεξάρτητος ὁ ἕνας κβαντικὸς ἀριθμὸς ἀπὸ τὸν ἄλλο.

Η συνολική ιδιοσυνάρτηση λόγω της (11) δίνεται από

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = N_{n_x n_y n_z}\, e^{-1/2(\rho_x^2+\rho_y^2+\rho_z^2)} H_{n_x}(\rho_x) H_{n_y}(\rho_y) H_{n_z}(\rho_z)$$

όπου $$N_{n_x n_y n_z} = N_{n_x} N_{n_y} N_{n_z} \qquad (14)$$

Στην ειδική περίπτωση όπου $\omega_x = \omega_y = \omega_z$ (ισότροπος αρμονικός ταλαντωτής) η ενεργειακή έκφραση γράφεται

$$E_{n_x n_y n_z} = (n + 3/2)\hbar\omega \qquad (15)$$

όπου $n = n_x + n_y + n_z$ ο "ολικός" κβαντικός αριθμός. Στην περίπτωση του ισότροπου αρμονικού ταλαντωτή ο βαθμός g εκφυλισμού της στάθμης είναι $g = \frac{(n+1)(n+2)}{2}$. Για $n=0$ ($n_x=n_y=n_z=0$), $g=1$ και η θεμελιώδης κατάσταση είναι μη εκφυλισμένη.