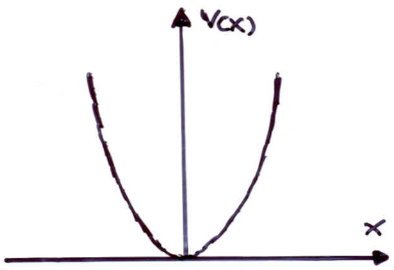
Αρμονικός Ταλαντωτής



$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

$$F = -\frac{\partial V}{\partial x} = -kx$$

"Όταν οι νόμοι μας έρχονται σε σύγκρουση με την πραγματικότητα αλλάζουμε τους νόμους, όχι την πραγματικότητα"

Γαλιλαίος

⇒ Αποτελεί μια καλή προσέγγιση ενός οποιουδήποτε δυναμικού στη γειτονία ενός σημείου ευσταθούς ισορροπίας

¿ ΓΙΑΤΙ ?

τυχαίο $V(x)$ – ανάπτυγμα Taylor – γύρω από $x=a$ →

$$V(x) = V(a) + V'(a)(x-a) + \frac{V''(a)}{2}(x-a)^2 + \cdots$$

έστω $a=0$: σημείο ευσταθούς ισορροπίας ⇒ $V'(0) = 0$, $V''(0) = k > 0$ ⇒

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \cdots \Rightarrow V(x) \approx \frac{1}{2}kx^2$$

• Εξ. Schrodinger : $-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi = E\psi$

• Διαστατική Απλοποίηση : $\hbar = m = \omega = 1$

⇒ $-\frac{1}{2}\psi'' + \frac{1}{2}x^2\psi = E\psi$ ⇒

$$\psi'' + (2E - x^2)\psi = 0$$

Πρόβλημα : ΔΕ με μεταβλητούς συντελεστές

Λύση : ψ ανάπτυγμα σε δυναμοσειρά

Απαίτηση : ψ: τετραγωνικά ολοκληρώσιμη $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty$

$$\psi(x) = \psi_\infty(x) \cdot H(x)$$

ασυμπτωτικός παράγοντας — πολυώνυμο

↳ $\psi_\infty(x) \xrightarrow[x\to\infty]{} 0$ ⇒ $\psi_\infty(x) = e^{-\lambda x^2}$

- ασυμπτωτική μορφή εξ. Schr.

$$\psi'' + (2E - x^2)\psi = 0$$
$$\Downarrow x \to \infty$$
$$\psi_\infty'' - x^2 \psi_\infty = 0$$

Δοκιμάζω $\psi_\infty = e^{-\lambda x^2}$ $\Rightarrow \psi_\infty' = -2\lambda x e^{-\lambda x^2} \Rightarrow \psi_\infty'' = -2\lambda e^{-\lambda x^2} + 4\lambda^2 x^2 e^{-\lambda x^2}$ $\Big\} \Rightarrow$

$$-2\lambda e^{-\lambda x^2} + 4\lambda^2 x^2 e^{-\lambda x^2} - x^2 e^{-\lambda x^2} = 0 \Rightarrow (4\lambda^2 x^2 - x^2 - 2\lambda)e^{-\lambda x^2} = 0 \Rightarrow$$

$$(4\lambda^2 - 1)x^2 - 2\lambda = 0 \xRightarrow{x \to \infty} 4\lambda^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda = \pm\frac{1}{2} \Rightarrow \lambda = +\frac{1}{2}$$

για να φθίνει στο ∞

$$\Rightarrow \psi_\infty(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$$

- Υπολογισμός πολυωνύμου $H(x)$

$$\left.\begin{array}{l} \psi'' + (2E - x^2)\psi = 0 \\ \psi = e^{-\frac{x^2}{2}} H \end{array}\right\} \Rightarrow \dots$$

$$\Downarrow$$
$$\psi' = -x e^{-\frac{x^2}{2}} H + e^{-\frac{x^2}{2}} H'$$
$$\Downarrow$$
$$\psi'' = -e^{-\frac{x^2}{2}} H + x^2 e^{-\frac{x^2}{2}} H - x e^{-\frac{x^2}{2}} H' - x e^{-\frac{x^2}{2}} H' + e^{-\frac{x^2}{2}} H''$$
$$\Rightarrow \psi'' = e^{-\frac{x^2}{2}}\left[H'' - 2xH' + (x^2 - 1)H\right]$$

$$\dots \Rightarrow e^{-\frac{x^2}{2}}\left[H'' - 2xH' + (x^2-1)H\right] + (2E - x^2)e^{-\frac{x^2}{2}} H = 0 \Rightarrow$$

$$H'' - 2xH' + (2E - 1)H = 0$$

αναπτύσσομε την H σε δυναμοσειρά $\quad H(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k$

για να τερματίζεται η σειρά σε πολυώνυμο βαθμού n πρέπει

$$2E - 1 = 2n \Rightarrow E_n = n + \frac{1}{2}$$

- Διαστατική Αποκατάσταση $(\epsilon = \hbar\omega)$ $\Rightarrow \boxed{E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega}$ $\quad n = 0, 1, 2, \dots$

ΔΕ: $H_n'' - 2xH_n' + 2nH_n = 0$ $\quad$ εξ. Hermite $\quad$ $H_n(x)$: πολυώνυμα Hermite integer are the *Hermite polynomials* (symbol H_v). These are polynomia[ls] (i.e. functions of the form $a_0 + a_1y + a_2y^2 + \ldots + a_vy^v$ running to a *fini[te]* number of terms, unlike $\cos y$, for example, which runs to an infinit[e] number of terms when expressed in the same way) which can be generate[d] by differentiating e^{-y^2} the appropriate number of times:

$$\textit{Hermite polynomials: } H_v(y) = (-1)^v e^{y^2}(d^v/dy^v)e^{-y^2}. \qquad (14.2.6)$$

The explicit forms of the first few polynomials are given in Box 14[.1] together with some of their most useful properties.

Box 14.1 Harmonic oscillator wavefunctions

Write $x = \alpha y$, where x is the displacement from equilibrium and

$$\alpha^2 = \hbar/(mk)^{\frac{1}{2}}, \qquad \omega^2 = k/m;$$

then the normalized wavefunctions are

$$\psi_v = N_v H_v(y)e^{-y^2/2}, \qquad N_v^2 = 1/\alpha\pi^{\frac{1}{2}}2^v v!$$

with $v = 0, 1, 2, \ldots$ and the $H_v(y)$ the following Hermite polynomials:

v	$H_v(y)$
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	$64y^6 - 480y^4 + 720y^2 - 120$

The Hermite polynomials (which continue up to infinite v) satisfy the equation

$$H_v'' - 2yH_v' + 2vH_v = 0$$

and the recursion relation

$$H_{v+1} = 2yH_v - 2vH_{v-1}.$$

An important integral is

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2}H_vH_{v'}\,dy \begin{cases} = 0 & \text{if } v' \neq v \\ = \pi^{\frac{1}{2}}2^v v! & \text{if } v' = v. \end{cases}$$

The wavefunction for the level with label v is the product of the Hermi[te] polynomial $H_v(y)$ and $e^{-y^2/2}$. We need to normalize it to unity, but this [is] easily done using the properties of the Hermite polynomials, for they hav[e] simple, standard integrals, as the following *Example* shows.

Example 14.3

Find the normalization constant for the harmonic oscillator wavefunctions.

- *Method*. Write the wavefunctions as

$$\psi_v(x) = N_v H_v(y)e^{-y^2/2}$$

and choose N_v so that

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_v^2\,dx = 1.$$

$$\psi_n(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x)$$

- $n=0 \Rightarrow \psi_0 = 1 \cdot e^{-\frac{x^2}{2}} \Rightarrow \psi_0 = e^{-\frac{x^2}{2}}$

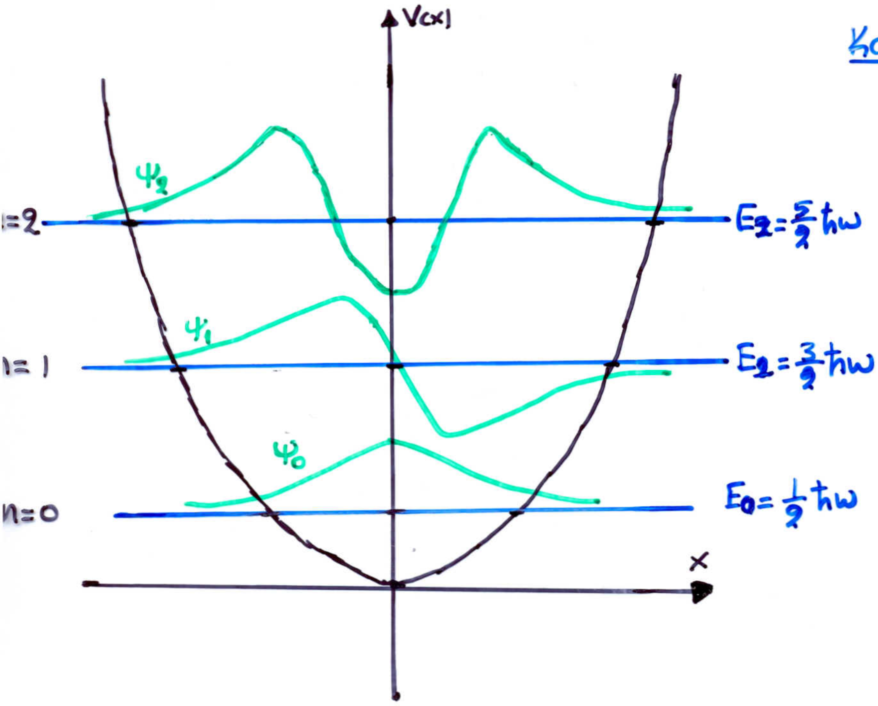
κανονικοποίηση

$$\left.\begin{array}{l} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_0(x)|^2 dx = 1 \\ \psi_0(x) = N \cdot e^{-\frac{x^2}{2}} \end{array}\right\} \Rightarrow N^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx}_{\sqrt{\pi}} = 1 \Rightarrow N = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \Rightarrow \boxed{\psi_0 = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}}$$

- $n=1 \Rightarrow \psi_1 = x e^{-\frac{x^2}{2}}$ κανονικοποίηση $\Rightarrow \boxed{\psi_1 = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{\pi}}}\, x e^{-\frac{x^2}{2}}}$

- Διαστατική Αποκατάσταση $\psi_n(x) \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{a}} \psi_n\left(\frac{x}{a}\right)$: $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ χαρακτηριστικό μήκος του προβλήματος

$$\boxed{\psi_n(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{2a^2}}}{\sqrt{a}} H_n\left(\frac{x}{a}\right)} : a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$



Κατασκευή Κυματοσυναρτήσεων

1. Θ. Κόμβων
2. Ασυμπτωτικός Παράγοντας
3. Οι λωβοί πλαταίνουν καθώς απομακρυνόμαστε από την αρχή και το ύψος τους μεγαλώνει.
4. Άρτιες ή Περιττές

Φυσική Ανάλυση Αποτελεσμάτων

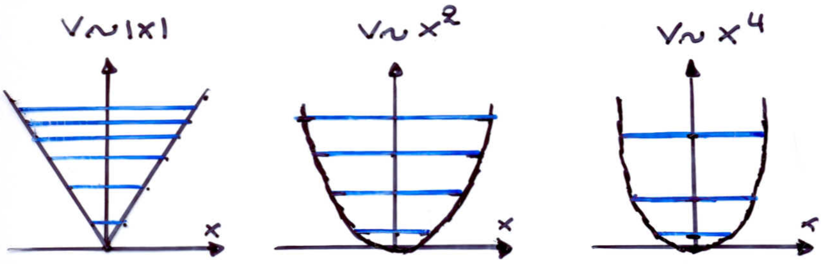
1. $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{\frac{k}{m}}$ κλασσικό όριο $\left.\begin{array}{l}\hbar \to 0 \\ m \to \infty\end{array}\right\} \Rightarrow E_0 \to 0$

   $E_0 \neq 0$

   ισχυρό κβαντικό όριο $\left.\begin{array}{l}\hbar \to \infty \\ m \to 0\end{array}\right\} \Rightarrow E_0 \to \infty$

2. $\psi_0 = N e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$, $a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = \sqrt{\frac{\hbar}{\sqrt{mk}}}$ κλασσικό όριο $\left.\begin{array}{l}\hbar \to 0 \\ m \to \infty\end{array}\right\} \Rightarrow \psi_0 \to 0$

3. Ισαπέχουσες στάθμες



$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = (n+1+\tfrac{1}{2})\hbar\omega - (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega$$

$$\Rightarrow \underline{\Delta E = \hbar\omega} \quad \neq f(n)$$

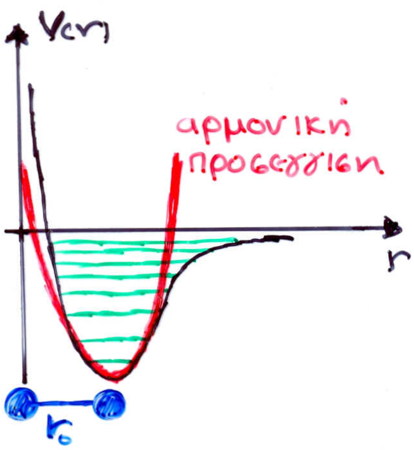
ιδιαίτερο χαρακτηριστικό αρμονικού ταλαντωτή

γιατί ? κλασσικά $\omega_{κλ} = \sqrt{\frac{k}{m}}$

κβαντικά $\omega_{κβ} = \dfrac{E_{n+1} - E_n}{\hbar}$

στο κλασσικό όριο $(n>>)$ $\Rightarrow$ $\omega_{κβ} = \dfrac{(n+1+\frac{1}{2})\hbar\omega_{κλ} - (n+\frac{1}{2})\hbar\omega_{κλ}}{\hbar} = \omega_{κλ}$

4. Προσέγγιση Ταλαντωτικού Φάσματος Διατομικών Μορίων



$$\left.\begin{array}{ll} \Delta E \approx \hbar\omega = \hbar\sqrt{\frac{k}{m}} & \text{αρμονικός ταλαντωτής} \\ \Delta E = h\nu_{πειρ} & \text{πείραμα} \end{array}\right\} \Rightarrow$$

$$\nu_{πειρ} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}} \Rightarrow \bar{\nu}_{πειρ} = \frac{1}{2\pi c}\sqrt{\frac{k}{m}}$$

για όλες τις διεγέρσεις $\Rightarrow$ φάσμα μιας γραμμής

θεμελιώδης συχνότητα ταλάντωσης

Για διατομικά μόρια $\sim 10^3\ cm^{-1}$ (IR) - IR spectroscopy

$\boxed{\text{ΑΣΚΗΣΗ}}$

→ Να βρεθεί η σταθερά ταλάντωσης του HCl

$H^{35}Cl$

$\bar{\nu}_{πειρ} = 2.90 \times 10^3 cm^{-1}$

$$\left.\begin{array}{l} \bar{\nu}_{πειρ} = \frac{1}{2\pi c}\sqrt{\frac{k}{m}} \Rightarrow k = (2\pi c\bar{\nu}_{πειρ})^2 m \\ m = \text{ανηγμένη μάζα} = \frac{35 \cdot 1}{35+1}(1.66\times10^{-27})\,kg \end{array}\right\} \Rightarrow$$

$$k = [2\times3.14159\times(3.00\times10^8\,m\cdot s^{-1})(2.90\times10^5\,m^{-1})]^2 \left(\tfrac{35}{36}\,1.66\times10^{-27}\,kg\right) \Rightarrow$$

$$k = 4.82 \times 10^2\ N\cdot m^{-1}$$