A harmonikus lineáris oszcillátor

Amikor egy részecskét fogva tartó erő lineáris erőtörvénnyel adható meg a következő módon:

$$F = -D\,x$$

ahol *D* az erőkonstans, akkor beszélünk harmonikus lineáris oszcillátorról, köznapi nyelven rúgóról. Ehhez az erőtörvényhez az

$$U(x) = (D/2)\,x^2$$

potenciálfüggvény tartozik. Tudjuk, hogy ilyenkor a klasszikus fizika szerint egy *m* tömegű részecske $\omega = \sqrt{D/m}$ körfrekvenciájú harmonikus rezgőmozgást végez az $x = 0$ hely körül. Ha a rezgő részecske egy mikrorészecske, akkor leírása az 1D Schrödinger-egyenlettel történik, de most az *U(x)* potenciális energia helyébe $U(x) = m\omega^2x^2/2$ konkrét kifejezést kell behelyettesíteni:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d}{d^2x}\,\varphi(x) + \frac{m\omega^2}{2}x^2\varphi(x) = E\,\varphi(x)$$

Sajnos az x^2-es potenciális energia-tag miatt ez az egyenlet már nem oldható meg egyszerűen. A megoldáshoz a Sommerfeld féle polinom módszer lehet alkalmazni. Ez a megoldási trükk 3 alapvető lépésből áll: először megkeressük az aszimptotikus megoldását az egyenletnek. Más szavakkal elmondva megoldjuk az egyenletet az *x* tart plusz/mínusz végtelen esetre. Új változók bevezetésével lehet egyszerűsíteni az egyenletet. Legyen

$$k = \frac{2E}{\hbar\omega} \text{ és } \xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\omega}}\,x$$

Ekkor az egyenlet átmegy a

$$\frac{d}{d^2\xi}\,\varphi(\xi) + (k - \xi^2)\varphi(\xi) = 0$$

egyenletbe. $x \to \infty$ esetén $\xi \to \infty$ is igaz, így a zárójelben *k* elhanyagolható a négyzetes tag mellett. Az egyenletünk tovább egyszerűsödik:

$$\frac{d}{d^2\xi}\,\varphi_{asz}(\xi) - \,\xi^2\varphi_{asz}(\xi) = \,0$$

ahol a φ_{asz} az aszimptotikus megoldast jelenti. Ezt a differenciál egyenletet könnyen meg lehet oldani az ξ→∞ esetre . A megoldás:

$$\varphi_{asz}(\xi) = \exp\,(-\frac{\xi^2}{2})$$

Második lépésben a kapott megoldást összeszorozzuk egy polinommal, amelynek fokát és együtthatóit még nem ismerjük.

$$p(\xi) = \sum_{i=1}^{n} c_i\xi^i$$

A teljes megoldás így

$$\varphi(\xi) = \varphi_{asz}(\xi)p(\xi)$$

Ezt beírva az eredeti egyenletbe és az exponenciális tényezővel egyszerűsítve kapjuk a polinomra a

$$\frac{d}{d^2\xi}\,p(\xi) - 2\xi\frac{d}{d\xi}\,p(\xi) + \,(k-1)p(\xi) = 0$$

Harmadik lépésként ezt a csak a polinomot tartalmazó differenciál egyenletet oldjuk meg. Kiszámítva a polinom első és második deriváltját, majd ezeket beírva az egyenletben kapjuk a következő összefüggést:

$$\sum_{i=0}^{n}\{(i+2)(i+1)c_{i+2} - (2i+1-k)c_i\}\xi^i = 0$$

Ez az egyenlet akkor teljesül minden ξ értékre, ha a ξ valamennyi hatványának együtthatója zérussal egyenlő, ami egyenértékű azzal, hogy a kapcsos zárójeleken belüli kifejezések egyenlők 0-val. Ebből egy rekurziós összefüggés írható fel a c_{i+2}-k és a c_i-k között:

$$c_{i+2} = \frac{2i+1-k}{(i+2)(i+1)}c_i$$

Be lehet látni, hogy a teljes megoldás csak akkor lesz reguláris, ha vagy csak páros, vagy csak páratlan i-k szerepelnek benne és egy adott $i = n$-

től kezdve mindegyik ettől nagyobb együttható nulla értéket vesz fel. Ebből következik, hogy

$$2n + 1 = k = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

Kifejezve a különböző *n* értékhez tartozó E_n értékeket kapjuk:

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

ahol n = 0,1,2,3, ... egész szám lehet.

Az ω körfrekvenciájú harmonikus oszcillátor energiája tehát csak *diszkrét* $\hbar\omega$ lépésekben változhat. Emlékeztetünk arra, hogy ez volt az a "matematikai kényszerűségből" bevezetett feltevés, amellyel Planck a fekete test sugárzását értelmezni tudta. Ez az eredmény a kvantummechanika alapegyenletének megoldásából minden külön feltevés nélkül következik.

Az energia kifejezéséből kitűnik, hogy az oszcillátor energiája nem lehet nulla, hanem van egy legkisebb energiaérték:

$$E_0 = \hbar\omega/2$$

Ezt hívjuk *zéruspont* energiának. Ennek létezése ellentmond a klasszikus fizikai szemléletünknek, mert nem engedi meg, hogy egy „rugó" az abszolút nulla energiájú állapotba kerüljön, ami ebben az esetben a nyugalmi helyzetet jelenti. Ez jellegzetesen kvantummechanikai eredmény, amely a Heisenberg féle határozatlansági összefüggés egy megnyilvánulása: ha ugyanis a részecske energiája nulla lenne, akkor ez azt jelentené, hogy pontosan tudjuk, hogy a részecske az origóban van és az impulzusa nulla, márpedig a határozatlansági összefüggés szerint ezt a két adatot egyidejűleg nem ismerhetjük tetszőleges pontosan.

A kapott eredmény még egy fontos különbséget mutat a klasszikus fizikai képünkhöz képest. A klasszikus fizika meghatározza azt a térbeli két határpontot, amely között mozog a részecske. A kvantummechanikai megoldás ilyen határpontokat nem jelöl ki. A sajátfüggvények exponenciálisan lecsengő függvények. Az ebből számolható megtalálási valószínűségek is hasonlóan viselkednek és sehol nem válnak nullává. Ezt azt jelenti, hogy bárhol megtalálhatóak a részecskék a térben.

Végezetül megjegyezzük, hogy pl. a mikrovilágban a kétatomos molekulák jó megvalósulási formái a harmonikus lineáris oszcillátoroknak.