

Kvantmekanisk harmonisk oscillator

19 okt. 2026, 5 min läsning

UTKAST

#fysik #kvantfysik #modell

Kurs: F0005T **Förkunskaper:** Schrödingerekvationen, Svängning

Med Hookes lag $F(x) = -k'x$ blir den potentiella energin $U(x) = \frac{1}{2}k'x^2$, och randvillkoret är att $\psi \rightarrow 0$ när $x \rightarrow \pm\infty$. Lösningarna ges av Hermitefunktioner. Energienivåerna blir jämnt fördelade till skillnad från lådans, så avståndet mellan två grannnivåer är alltid $\Delta E = \hbar\omega$, vilket motsvarar fotoner i IR-området. Den lägsta nivån ligger inte i noll utan på $\frac{1}{2}\hbar\omega$.

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega, \quad \omega = \sqrt{\frac{k'}{m}}$$

Formeln, symbol för symbol

$$E_n = (\underbrace{n}_{\text{antal steg}} + \underbrace{\frac{1}{2}}_{\text{noll-punkten}}) \underbrace{\hbar\omega}_{\text{ett steg}}$$
$$\omega = \sqrt{\frac{\overbrace{k'}^{\text{fjäderkonstanten}}}{\underbrace{m}_{\text{massan}}}}$$

Nivåerna bildar en stege där alla steg är lika höga, $\hbar\omega$, och det lägsta ligger ett halvt steg över botten. En styvare fjäder eller en lättare massa ger högre steg.

1. Schrödingerekvationen för oscillatorn

Klassiskt svänger en massa i en fjäder med vinkelfrekvensen $\omega = \sqrt{k'/m}$ (se **Svängning**) mellan två vändpunkter $\pm A$. Där är all energi potentiell, så $\frac{1}{2}k'A^2 = E$. Kvantmekaniskt sätter vi in $U = \frac{1}{2}k'x^2$ i Schrödingerekvationen:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}k'x^2\psi = E\psi$$

Dessutom måste $\psi \rightarrow 0$ när $|x| \rightarrow \infty$, annars går vågfunktionen inte att normera.

2. Varför bara vissa energier

Skriv om ekvationen så att krökningen står ensam:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2}k'x^2 - E \right) \psi$$

- **Innanför vändpunkterna** är parentesens negativ. Då har $d^2\psi/dx^2$ motsatt tecken mot ψ , kurvan böjer sig mot x -axeln och ψ oscillerar.
- **Utanför vändpunkterna** är parentesens positiv. Då böjer kurvan bort från axeln, och en godtycklig lösning växer utan gräns.

Bara för vissa värden på E lämnar kurvan det oscillerande området precis så att den närmar sig noll på båda sidor. Det är de energier som ingressens formel ger. Samma resonemang förklarar kvantiseringen i den **ändliga brunnen**.

3. Grundtillståndet

Den lägsta lösningen är en Gaussklocka utan nollställen:

$$\psi_0(x) = Ce^{-\sqrt{mk'}x^2/2\hbar}$$

Kontroll av grundtillståndet och normering

Kortform. Sätt $\alpha = \sqrt{mk'}/\hbar = m\omega/\hbar$ så att $\psi_0 = Ce^{-\alpha x^2/2}$.

Derivera två gånger.

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\alpha x \psi_0$$

$$\frac{d^2\psi_0}{dx^2} = (\alpha^2 x^2 - \alpha) \psi_0$$

Sätt in i ekvationen.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\alpha^2 x^2 - \alpha)\psi_0 + \frac{1}{2}k'x^2\psi_0 = E\psi_0$$

Termerna med x^2 . De tar ut varandra för alla x , och det är därför α valdes som den gjordes:

$$\frac{\hbar^2\alpha^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{mk'}{\hbar^2} = \frac{k'}{2}$$

Konstanta termer. Det som blir kvar är energin:

$$E = \frac{\hbar^2\alpha}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

Det är E_0 i ingressens formel.

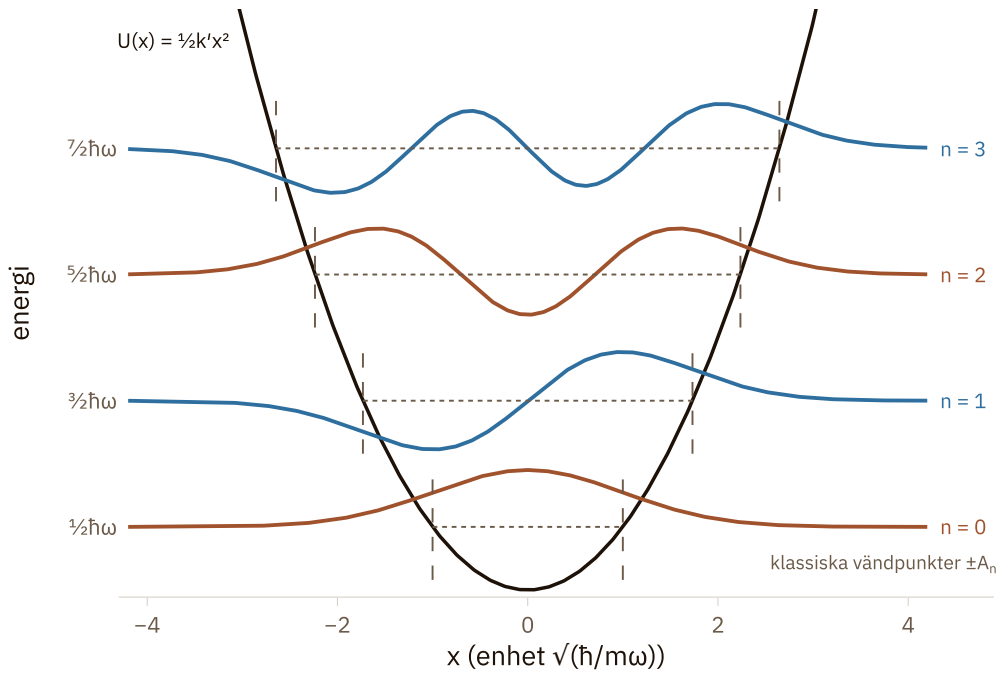
Normering. Med Gaussintegralen $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\pi/\alpha}$:

$$C^2 \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = 1 \quad \Rightarrow \quad C = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}$$

Med $\sqrt{mk'} = m\omega$ blir det normerade grundtillståndet

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}$$

De högre tillstånden är samma Gaussfaktor multiplicerad med ett polynom av grad n , ett Hermitepolynom. ψ_n har n nollställen och är omväxlande jämn och udda.



De fyra lägsta tillstånden ritade på sina energinivåer i parabeln. De streckade linjerna markerar de klassiska vändpunkterna $\pm A_n$, och vågfunktionerna sträcker sig en bit utanför dem.

4. Jämförelse med den klassiska oscillatoren

Amplituden. En klassisk oscillator med energin E_n har amplituden A_n , där $\frac{1}{2}k'A_n^2 = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$. Med $k' = m\omega^2$ blir

$$A_n = \sqrt{\frac{(2n+1)\hbar}{m\omega}}$$

Utanför vändpunkterna. I grundtillståndet ligger ungefär 16 % av sannolikheten utanför $\pm A_0$. Där kan partikeln klassiskt aldrig vara, precis som inuti en barriär vid **tunnling**.

Var partikeln helst är. En klassisk massa rör sig långsammast vid vändpunkterna och är därför oftast där. I kvantmekanikens grundtillstånd är det tvärtom mest sannolikt att hitta partikeln i mitten. För stora n närmar sig $|\psi_n|^2$ i medeltal den klassiska fördelningen, som korrespondensprincipen kräver.

Nollpunktsenergin. Energin kan inte vara noll. Då skulle partikeln ligga still exakt i $x = 0$, med både $\Delta x = 0$ och $\Delta p = 0$. Grundtillståndet har de minsta spridningar som **Heisenbergs osäkerhetsprincip** tillåter:

$$\Delta x = \frac{A_0}{\sqrt{2}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad \Delta p = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}$$

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

Fysika: Fd3 (Heisenbergs osäkerhetsrelation, $\Delta p_x \cdot \Delta x \geq h/4\pi$; grundtillståndet ger likhet)

Härledning av Δx och Δp

Läget. Medelvärdet av x är noll av symmetriskäl, så $(\Delta x)^2$ är medelvärdet av x^2 . Med $|\psi_0|^2 = C^2 e^{-\alpha x^2}$ och $\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2} dx = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$:

$$(\Delta x)^2 = C^2 \cdot \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{1}{2\alpha} = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

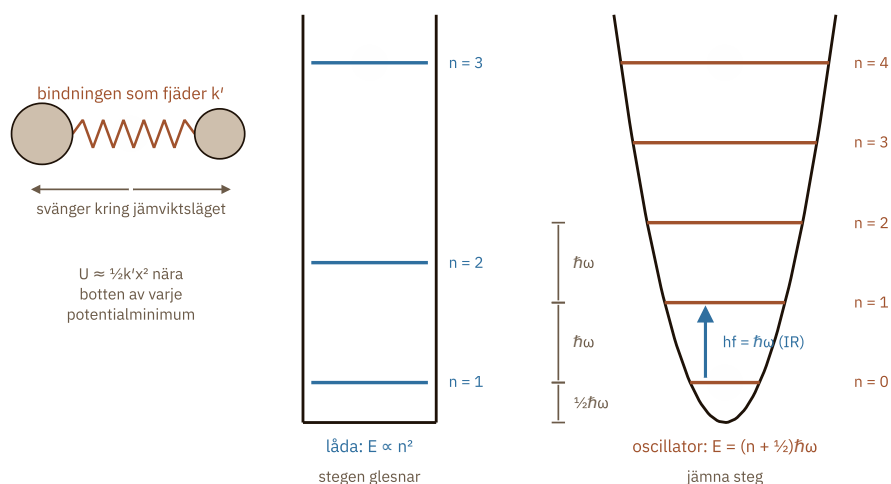
Rörelsemängden. Energin fördelar sig lika på kinetisk och potentiell i medeltal, så medelvärdet av $p^2/2m$ är $\frac{1}{2}E_0$:

$$\frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{1}{4}\hbar\omega \quad \Rightarrow \quad (\Delta p)^2 = \frac{m\hbar\omega}{2}$$

Produkten.

$$\Delta x \Delta p = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega} \cdot \frac{m\hbar\omega}{2}} = \frac{\hbar}{2}$$

Tillämpningar. Nära botten ser nästan varje potentialminimum ut som en parabel, så modellen beskriver vibrationer i molekyler och kristaller. I en tvåatomig molekyl byts m mot den **reducerade massan** m_r . Övergången $n \rightarrow n+1$ absorberar en foton med $hf = \hbar\omega$, oftast i infrarött. Se **Molekylvibration**.



Vänster: en tvåatomig molekyl, där bindningen fungerar som en fjäder. Höger: på samma energiskala glesnar lådans nivåer som n^2 , medan oscillatorns ligger på jämna steg $\hbar\omega$ ovanför nollpunktsenergin $\frac{1}{2}\hbar\omega$. Varje steg uppåt kostar samma foton, oftast i infrarött.

⚠ Vanliga fel

- **n börjar på 1.** Grundtillståndet är $n = 0$ med $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Det är inte $\hbar\omega$ och inte noll.
- **ω och f blandas ihop.** Nivåavståndet är $\hbar\omega = hf$. Skriver man $h\omega$ blir det 2π gånger för stort.
- **Nivåavståndet tros växa med n .** I lådan växer E_n som n^2 , men i oscillatorn är avståndet alltid $\hbar\omega$.
- **Massan i stället för den reducerade massan.** I en molekyl svänger båda atomerna, så $\omega = \sqrt{k'/m_r}$.
- **k' blandas ihop med vågtalet k .** Primecknet skiljer fjäderkonstanten från vågtalet.

5. Lösta exempel

≡ Exempel – Kolmonoxidens vibration

En kolmonoxidmolekyl absorberar infrarött ljus med våglängden $4,67 \mu\text{m}$ när den går från vibrationens grundtillstånd till första exciterade tillståndet. Atommassorna är $12,000 \text{ u}$ för kol och $15,995 \text{ u}$ för syre. Behandla vibrationen som en harmonisk oscillator.

a) Beräkna avståndet mellan vibrationsnivåerna i eV. b) Beräkna vinkelfrekvensen och bindningens kraftkonstant. c) Beräkna nollpunktsenergin.

✍ Lösning

a) Nivåavståndet. Fotonens energi är skillnaden mellan två grannivåer:

$$\hbar\omega = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{4670 \text{ nm}} \approx \boxed{0,265 \text{ eV}}$$

b) Vinkelfrekvensen.

$$\omega = \frac{0,2655 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19}}{1,055 \cdot 10^{-34}} \approx \boxed{4,03 \cdot 10^{14} \text{ rad/s}}$$

Fysika: Te ($e, \hbar$)

Reducerade massan.

$$m_r = \frac{12,000 \cdot 15,995}{12,000 + 15,995} \text{ u} = 6,856 \text{ u} = 1,14 \cdot 10^{-26} \text{ kg}$$

Kraftkonstanten. Ur $\omega = \sqrt{k'/m_r}$:

$$k' = m_r \omega^2 = 1,139 \cdot 10^{-26} \cdot (4,034 \cdot 10^{14})^2 \approx \boxed{1,85 \cdot 10^3 \text{ N/m}}$$

c) Nollpunktsenergin.

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega = \boxed{0,133 \text{ eV}}$$

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

≡ Exempel – Elektron i en harmonisk fälla

En elektron är instängd i en potential som kan beskrivas som en harmonisk oscillator med nivåavståndet $\hbar\omega = 50,0 \text{ meV}$.

a) Beräkna vinkelfrekvensen och våglängden hos den foton som lyfter elektronen från $n = 0$ till $n = 1$. b) Beräkna den klassiska amplituden A_0 för grundtillståndets energi. c) Beräkna Δx och Δp i grundtillståndet och visa att produkten är $\hbar/2$.

Lösning

a) Vinkelfrekvensen.

$$\omega = \frac{0,0500 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19}}{1,055 \cdot 10^{-34}} \approx \boxed{7,60 \cdot 10^{13} \text{ rad/s}}$$

Fotonen. Dess energi är $\hbar\omega$:

$$\lambda = \frac{1240 \text{ eV} \cdot \text{nm}}{0,0500 \text{ eV}} = 24\,800 \text{ nm} = \boxed{24,8 \text{ } \mu\text{m}}$$

b) Amplituden. Med $n = 0$:

$$A_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e \omega}} = \sqrt{\frac{1,055 \cdot 10^{-34}}{9,109 \cdot 10^{-31} \cdot 7,596 \cdot 10^{13}}} \approx \boxed{1,23 \text{ nm}}$$

c) Spridningen i läge.

$$\Delta x = \frac{A_0}{\sqrt{2}} = \boxed{0,873 \text{ nm}}$$

Spridningen i rörelsemängd.

$$\Delta p = \sqrt{\frac{m_e \hbar \omega}{2}} = \sqrt{\frac{9,109 \cdot 10^{-31} \cdot 0,0500 \cdot 1,602 \cdot 10^{-19}}{2}} \approx \boxed{6,04 \cdot 10^{-26} \text{ kg} \cdot \text{m/s}}$$

Produkten.

$$\Delta x \Delta p = 8,73 \cdot 10^{-10} \cdot 6,04 \cdot 10^{-26} = 5,27 \cdot 10^{-35} \text{ J} \cdot \text{s} = \frac{\hbar}{2}$$

Grundtillståndet ligger alltså precis på gränsen i osäkerhetsprincipen.

Ej kontrollerat mot facit – två oberoende lösningar stämmer överens.

Läsning

- 40.5 The Harmonic Oscillator