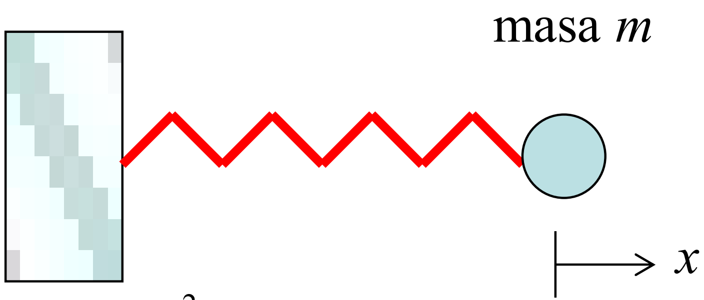
# Kwantowy oscylator harmoniczny- podstawowe własności, porównanie z oscylatorem klasycznym

# Klasyczny jednowymiarowy oscylator harmoniczny




$a = \frac{d^2 x}{dt^2}$

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

Równanie ruchu: $ma = F \Rightarrow m\frac{d^2 x}{dt^2} = -kx$

i jego rozwiązanie $x = A\cos(\omega t + \delta_0)$ opisuje drgania harmoniczne

gdzie $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ -częstość kołowa drgań *A*-amplituda drgań

Energia potencjalna $V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$

Całkowita energia oscylatora $E = E_{kin} + V = \frac{m\left(\frac{dx}{dt}\right)^2}{2} + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 = const$

Amplitudę drgań *A* można uzależnić od całkowitej energii oscylatora $A = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$

Ruch oscylatora jest ograniczony do $x$ z zakresu $-A < x < A$ czyli obszaru w którym $E_{kin} \geq 0 \Leftrightarrow V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \leq E$

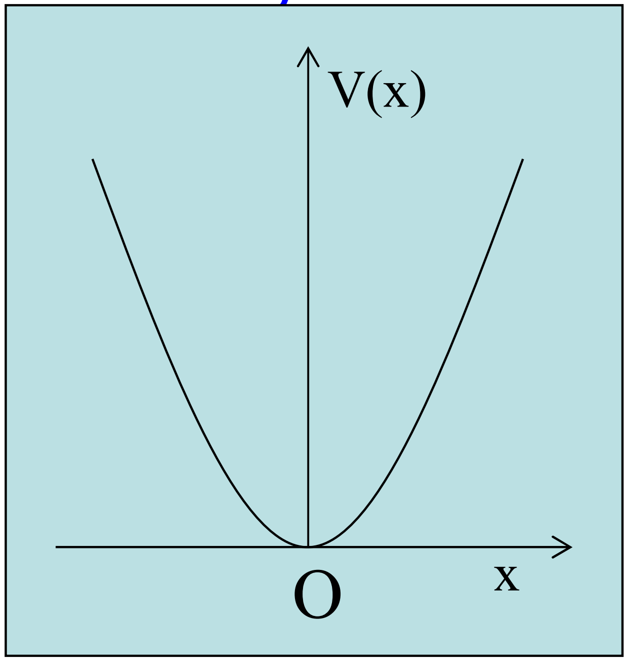
Brak ograniczeń na możliwe energie oscylatora poza tym iż $E \geq 0$. Oscylator może w szczególności mieć energie równą zeru co odpowiada $A=0$ czyli spoczynkowi w położeniu równowagi.

# Jednowymiarowy oscylator harmoniczny

Oscylatorem nazywamy w ogólności układ , dla którego potencjał jest opisany funkcją kwadratową położenia daną wzorem

$$V = \frac{1}{2}kx^2$$

gdzie $k$ stała dodatnia




Przykłady układów do opisu których można zastosować opis wprowadzony dla oscylatora :

1) Drgające atomy w cząsteczkach

Potencjał w jakim poruszają się atomy wokół położeń równowagi $R=R_{eq}$ (w którym potencjał przyjmuje wartość minimalną) w cząsteczkach można, gdy wychylenie atomów z położenia równowagi $x=R-R_{eq}$ jest nieduże, wyrazić przez potencjał oscylatora harmonicznego

$$V(R) = V(R_{eq}) + \left(\frac{dV}{dR}\right)_{R=R_{eq}} x + \frac{1}{2}\left(\frac{d^2V}{dR^2}\right)_{R=R_{eq}} x^2 + \frac{1}{8}\left(\frac{d^3V}{dR^3}\right)_{R=R_{eq}} x^3 + \ldots\ldots \approx \frac{1}{2}\left(\frac{d^2V}{dR^2}\right)_{R=R_{eq}} x^2 = \frac{1}{2}kx^2$$

można przyjąć jako 0 $\quad$ 0 $\quad$ dąży do 0

$$\left(\frac{d^2V}{dR^2}\right)_{R=R_{eq}} \overset{ozn.}{=} k$$

2) złożone kolektywne drgania atomów w krysztale można opisać w postaci superpozycji harmonicznych drgań normalnych o różnych częstościach drgań

3) drgania pola elektrycznego i magnetycznego fali elektromagnetycznej

# Kwantowy jednowymiarowy oscylator harmoniczny

W celu znalezienia dozwolonych energii $E$ i odpowiadających im funkcji falowych dla oscylatora o masie $m$ musimy rozwiązać niezależne od czasu równanie Schrödingera z potencjałem:

$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ $k$-stała dodatnia, $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ -klasyczna częstość kołowa drgań

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \Rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi(x) = E\psi(x)$$

Oczywiście funkcje będące rozwiązaniem tego równania muszą mieć ponadto tą własność iż nie mogą nigdzie osiągać wartości nieskończonych co sprowadza się w naszym przypadku do warunku iż dla $x \to \pm\infty$ mamy $\psi \to 0$

Funkcje spełniające ten warunek można znaleźć tylko dla dyskretnych wartości energii $E$ określanych dalej jako dozwolone energie oscylatora (dowód w dodatku dla osób zainteresowanych )

Nie da się ich zapisać przy pomocy funkcji elementarnych, można je zapisać np. przy wykorzystaniu szeregów (które urywamy na pewnym wyrazie aby funkcja falowa nie osiągała wartości nieskończonych tworząc wielomiany) lub funkcji specjalnych

# Wyniki rozwiązania równania Schrödinera

Dozwolone energie oscylatora $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ $n$=0,1,2,…..

Funkcję spełniającą niezależne od czasu równanie Schrödingera unormowaną tak iż $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx = 1$ można przyjąć w postaci

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

gdzie $H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) = H_n(\xi)$ -wielomian Hermite'a, który można określić ze

wzoru $H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \frac{d^n}{d\xi^n} \exp(-\xi^2)$ np. $H_0(\xi) = 1;$ $H_1(\xi) = 2\xi$

$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2$ $H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi$

Funkcja falowa opisująca oscylator w stanie stacjonarnym o energii $E_n$

$$\Psi_n(x,t) = \psi_n(x) f_n(t) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right)$$

# Kwantowy jednowymiarowy oscylator harmoniczny-podstawowe własności

1) Energia oscylatora może przyjmować tylko dyskretne wartości dane wzorem

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

a odległość w skali energii kolejnych dozwolonych poziomów energetycznych oscylatora jest stała i równa

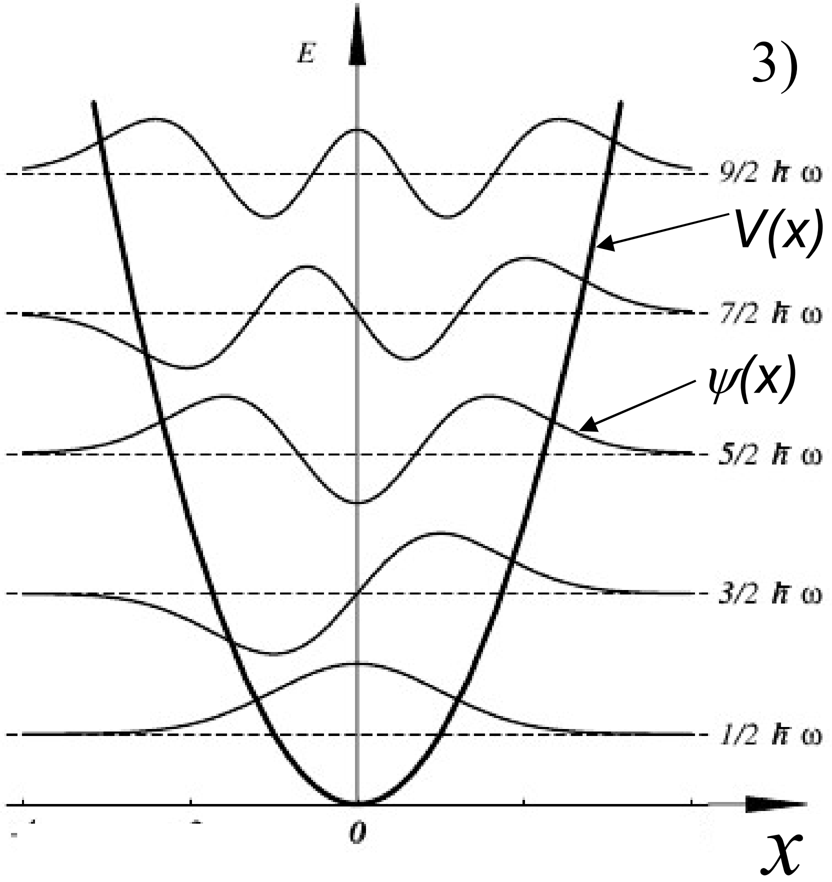
$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$$

*Uwaga. Brak obserwacji kwantowania energii w przypadku oscylatora klasycznego wiąże się z faktem iż energia $\hbar\omega$ jest bardzo mała w stosunku do wartości energii jakie może zwykle taki oscylator posiadać.*

Kwantowanie energii pozwala m.in. na wytłumaczenie występowania zależności ciepła właściwego kryształów od temperatury nie przewidywanej w klasycznym modelu ciepła właściwego

2) Najmniejsza energia oscylatora tzw. energia drgań zerowych jest równa $E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}$ czyli oscylator nie może mieć energii równej zeru.

*Gdyby oscylator miał energię równa zeru , to znalibyśmy dokładnie jego pęd (równy p=0) oraz położenie x=0, co nie jest możliwe na mocy zasady nieoznaczoności.*

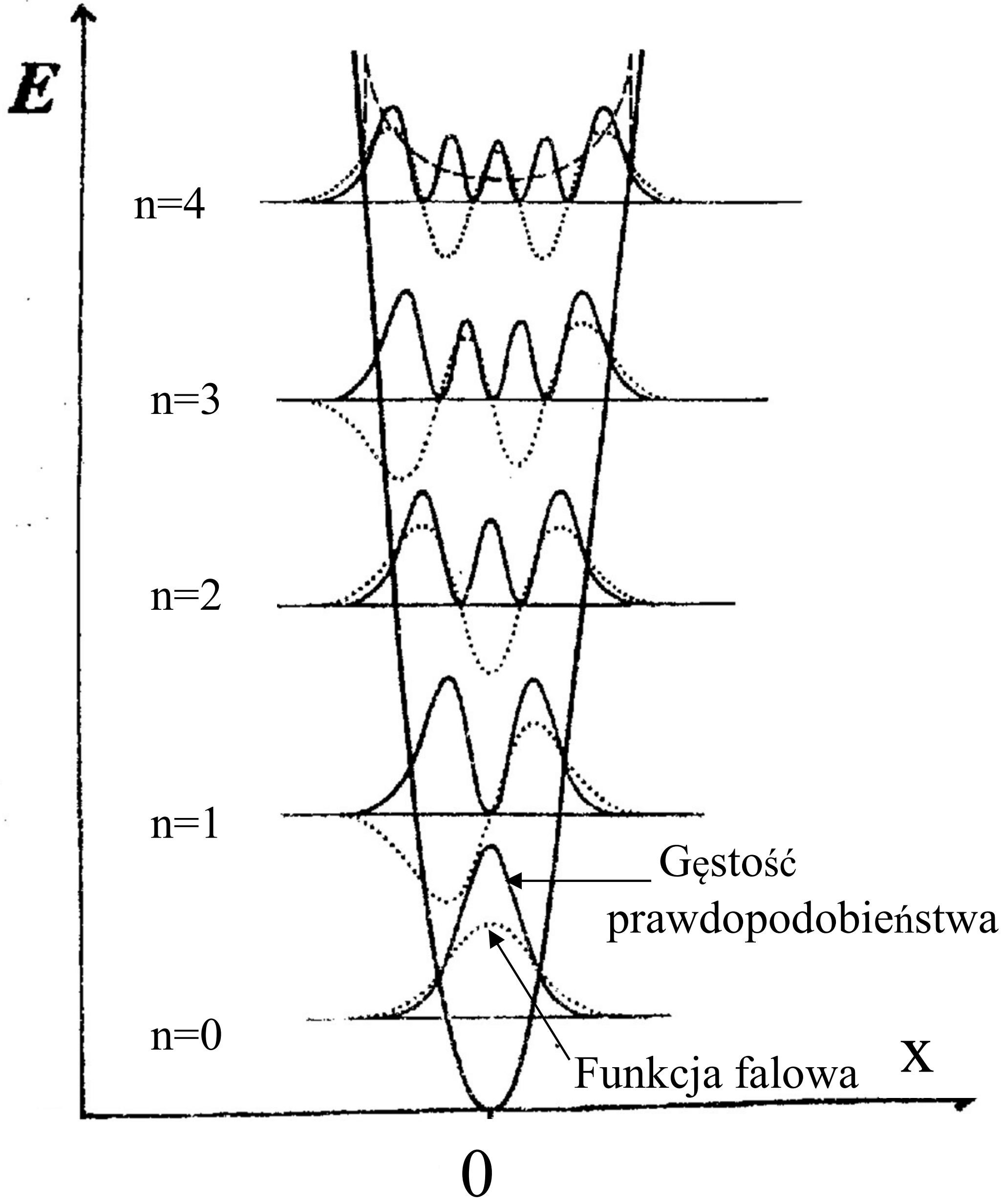



3) W przeciwieństwie do oscylatora klasycznego w przypadku oscylatora kwantowego (podobnie jak dla każdej cząstki kwantowej) nie możemy określić zależności położenia cząstki zachowującej się jak oscylator kwantowy od czasu. Znając postać funkcji falowych można jednak znaleźć gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w przestrzeni która w przypadku oscylatora znajdującego się w stanie stacjonarnym (o ustalonej energii) nie zależy od czasu i zależy od rozwiązania równania niezależnego do czasu

$$\rho(x) = \left|\Psi_n(x,t)\right|^2 = \left|\psi_n(x)\right|^2$$

4) Funkcja falowa wnika w obszar o $|x| > A$ w którym $E<V$ a więc cząstka według mechaniki klasycznej miałaby ujemną energie kinetyczną. Istnieje skończone prawdopodobieństwo znalezienia cząstki poza obszarem klasycznie dostępnym.

5) W obszarze klasycznie dostępnym $|x| < A$ funkcja falowa, a więc i gęstość prawdopodobieństwa $\rho(x)$ oscyluje, przy czym liczba oscylacji rośnie ze wzrostem $n$ W stanach o $n$>1 w obszarze klasycznie dostępnym można znaleźć punkty, w których gęstość prawdopodobieństwa jest równa zeru. Liczba takich punktów rośnie ze wzrostem $n$ czyli wzrostem energii oscylatora.




6) W stanie podstawowym o $n$=0 największe prawdopodobieństwo znalezienia cząstki występuje dla x≅0 podczas gdy w modelu klasycznym największe prawdopodobieństwo znalezienia cząstki występuje dla $|x| \approx A$ , gdyż w tych punktach cząstka porusza się najwolniej. Taką własność wykazuje gęstość prawdopodobieństwa dla oscylatora znajdującego się w stanach o wysokiej energii gdy $n \to \infty$, kiedy uśredniona po $x$ funkcja gęstości prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w przestrzeni jest zbliżona do gęstości określonej w mechanice klasycznej (przejaw zasady korespondencji).

7) Funkcje będące rozwiązaniem równania Schrödingera niezależnego do czasu opisujące oscylator w stanie o określonej energii są funkcjami parzystymi lub nieparzystymi tzn. spełniają relację $\psi(-x)=\pm\psi(x)$ co wynika z tego iż $V(-x)=V(x)$

## Przykładowe pytania opisowe

1) Kwantowy jednowymiarowy oscylator harmoniczny- określić podstawowe własności cząstki kwantowej poruszającej się potencjale opisującym jednowymiarowy oscylator harmoniczny. Wskazać różnicę pomiędzy własnościami takiej cząstki przewidywanymi przez mechanikę kwantową a własnościami takiej samej cząstki przewidywanymi przez mechanikę klasyczną. Zwrócić szczególną uwagę na możliwe wyniki pomiarów energii cząstki oraz prawdopodobieństwo jej znalezienia w różnych obszarach przestrzeni.

# Przykładowe pytania testowe

1) Energia kwantowego jednowymiarowego oscylatora harmonicznego tzn. cząstki o masie $m$ poruszającej się w obszarze potencjału danego wzorem $V = \frac{1}{2}kx^2$ wyraża się wzorem: $E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$

(gdzie $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, $h$-stała Plancka, $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$).

Czy liczba $n$ w powyższym wzorze może być

a) wielokrotnością liczby $\frac{1}{2}$ spełniającą warunek $n \geq -\frac{1}{2}$ tzn. $n = -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \ldots\ldots\ldots\ldots$

b) dowolną liczbą naturalną łącznie z zerem tzn. $n = 0,1,2,3,4,\ldots..$

c) dowolną liczbą całkowitą tzn. $n = \ldots\ldots.. -4,-3,-2,-1,0,1,2,3,4,\ldots..$

d) dowolną liczbą rzeczywistą?

**Zaznaczyć poprawną odpowiedź.**

2) Zakładając, iż $A$ oznacza klasyczna amplitudę drgań oscylatora harmonicznego czyli cząstki poruszającej się potencjale $V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ zależną od energii oscylatora $E$ i daną wzorem $A = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$ określić, które z poniższych twierdzeń są słuszne w przypadku kwantowego oscylatora?

a) Istnieje prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w obszarze w którym $x>A$.

b) Gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w obszarze w którym $-A<x<A$ nie zależy od $x$.

c) W stanie podstawowym o najniższej energii gęstość prawdopodobieństwa znalezienia oscylatora jest maksymalna dla $x \approx \pm A$.

d) Istnieją stany stacjonarne w przypadku których gęstość prawdopodobieństwa znalezienia oscylatora jest równa zeru w punktach dla których $-A<x<A$.

**Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.**

3) Zakładając, iż $A$ oznacza klasyczną amplitudę drgań oscylatora zależną od energii oscylatora $E$ i daną wzorem $A = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$ ($\omega$ - częstość kołowa drgań) określić, które z poniższych stwierdzeń opisujących własności kwantowego oscylatora są prawdziwe.

a) Odstępy pomiędzy dozwolonymi wartościami energii oscylatora rosną wraz ze wzrostem tej energii.

b) Odstępy między dozwolonymi energiami oscylatora są jednakowe.

c) W obszarze $x>A$ gęstość prawdopodobieństwa znalezienia oscylatora rośnie wraz ze wzrostem $x$.

d) W obszarze $x>A$ gęstość prawdopodobieństwa znalezienia oscylatora traktowana jako funkcja $x$ jest dana funkcją niemonotoniczną (gęstość ta oscyluje wraz ze zmianami $x$).

e) Energia kwantowego oscylatora nie może być równa zeru.

f) Energia kwantowego oscylatora jest zawsze dodatnia.

**Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.**

## Rozwiązanie równania Schrödingera niezależnego od czasu ( dla zainteresowanych)

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

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

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\psi=\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \qquad (*)$$

Wprowadzając bezwymiarową zmienną $\xi=\alpha x$

gdzie $\alpha=\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$

oraz bezwymiarową wielkość proporcjonalną do energii $\lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}$

zauważając iż

$$\frac{d}{dx}=\frac{d}{d\xi}\frac{d\xi}{dx}=\alpha\frac{d}{d\xi}\,; \qquad \frac{d^2}{dx^2}=\alpha^2\frac{d^2}{d\xi^2} \qquad ;\ \frac{2mE}{\hbar^2}=\frac{m\omega}{\hbar}\cdot\frac{2E}{\hbar\omega}=\alpha^2\lambda$$

można równanie (*) zapisać w postaci bezwymiarowej

$$-\alpha^2\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+\alpha^2\xi^2\psi=\alpha^2\lambda\psi$$

gdzie $\psi=\psi(\xi)$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+\left(\lambda-\xi^2\right)\psi=0 \qquad (**)$$

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+\left(\lambda-\xi^2\right)\psi=0 \qquad (**)$$

Asymptotyczna postać dla $\xi \to \pm\infty$ powyższego równania przybiera formę

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2}-\xi^2\psi=0$$

a jego przybliżone rozwiązanie asymptotyczne dla $\xi \to \pm\infty$ spełniające warunek $\psi < \infty$ ma postać $\psi = A\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$ (równanie asymptotyczne (**) jest spełnione przez $\psi = A\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)$ gdy po określeniu $\frac{d^2\psi}{d\xi^2}$ zachowa się w otrzymanym wyrażeniu

tylko wyrazy proporcjonalne do $\xi^2$ )

Szukamy rozwiązania równania (**) w postaci $\psi(\xi)=\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H(\xi)$ (***)

$H(\xi)$ -funkcja o takiej własności iż $\psi(\xi)\to 0$ dla $\xi \to \pm\infty$

Ponieważ

$$\frac{d\psi(\xi)}{d\xi}=\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)\left[\frac{dH}{d\xi}-\xi H\right] \qquad \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2}=\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)\left[\frac{d^2H}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH}{d\xi}+\left(\xi^2-1\right)H\right]$$

to po wstawieniu (***) do (**) otrzymujemy

$$\frac{d^2H}{d\xi^2}-2\xi\frac{dH}{d\xi}+(\lambda-1)H=0 \qquad (****)$$

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH}{d\xi} + (\lambda - 1)H = 0 \qquad (****)$$

Szukamy $H$ w postaci szeregu $H = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j$ i wstawiamy go do równania (****) . Ponieważ

$$\frac{dH}{d\xi} = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j \xi^{j-1}$$

$$\frac{d^2H}{d\xi^2} = \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) a_j \xi^{j-2}$$

to otrzymujemy

$$\sum_{j=0}^{\infty} a_j j(j-1)\xi^{j-2} - \sum_{j=0}^{\infty} 2a_j j\xi^j + \sum_{j=0}^{\infty} (\lambda - 1) a_j \xi^j = 0$$

$$\sum_{j=2}^{\infty} a_j j(j-1)\xi^{j-2} - \sum_{j=1}^{\infty} 2a_j j\xi^j + \sum_{j=0}^{\infty} (\lambda - 1) a_j \xi^j = 0$$

zmiana indeksu sumowania $j \to j+2$

$$\sum_{j=0}^{\infty} a_{j+2}(j+2)(j+1)\xi^j - \sum_{j=1}^{\infty} 2a_j j\xi^j + \sum_{j=0}^{\infty} (\lambda - 1) a_j \xi^j = 0$$

(*****)

$$\sum_{j=0}^{\infty}\left((j+2)(j+1)a_{j+2}-(2j+1-\lambda)a_j\right)\xi^j=0$$

(*****)

Równanie (*****) jest spełnione gdy wszystkie współczynniki stojące przy wyrazach $\xi^j$ dla kolejnych liczb $j$ w powyższym równaniu są równe zeru czyli $(j+2)(j+1)a_{j+2}-(2j+1-\lambda)a_j=0$

Otrzymaliśmy równanie rekurencyjne wiążące współczynnik $a_{j+2}$ ze współczynnikiem $a_j$ :

$$a_{j+2}=\frac{(2j+1-\lambda)}{(j+2)(j+1)}a_j$$

Uwzględnienie tego związku pozwala nam na określenie explicite szeregu *H* jak i wyznaczenie ogólnego rozwiązania równania różniczkowego 2 rzędu (**) zależnego od dwóch stałych dowolnych $a_0$ i $a_1$. Rozwiązanie to nie spełnia warunku iż funkcja falowa opisująca oscylator musi być funkcją skończoną dla $\xi\to\pm\infty$ . Widać iż $\frac{a_{j+2}}{a_j}\underset{j\to\infty}{\to}\frac{2}{j}$ ( szereg *H* jest rozbieżny )

Takim samym stosunkiem $\frac{a_{j+2}}{a_j}$ dla $j\to\infty$ charakteryzuje się rozwinięcie w szereg funkcji $\exp\left(\xi^2\right)=1+\xi^2+\frac{\xi^4}{2!}+\frac{\xi^6}{3!}+....$

dla którego $\frac{a_{j+2}}{a_j}=\frac{(j/2)!}{(j/2+1)!}=\frac{1}{j/2+1}\overset{j\to\infty}{\approx}\frac{2}{j}$

A zatem $H \underset{\xi \to \pm\infty}{\propto} \exp(\xi^2)$

czyli $\psi = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H \underset{\xi \to \pm\infty}{\propto} \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right)$

($H, \psi \to \infty$ dla $\xi \to \pm\infty$)

Żeby funkcja falowa była skończona trzeba przyjąć iż szereg potęgowy $H = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j$ urywamy na dowolnie wybranym wyrazie indeksowanym przez $j=n$ czyli $a_j = 0$ dla $j > n$.

Warunek powyższy będzie spełniony gdy

$$2n + 1 - \lambda = 0 \qquad (******)$$

(gdyż wówczas $a_{n+2} = \frac{(2n+1-\lambda)}{(j+2)(j+1)} a_n = 0$)

i ponadto $a_j = 0$ dla $j$ nieparzystego gdy $n$ parzyste

(wówczas $H = a_0\xi^0 + a_2\xi^2 + ..... + a_n\xi^n$) (zapewnia to przyjęcie $a_1 = 0$ )

lub $a_j = 0$ dla $j$ parzystego gdy $n$ nieparzyste

(wówczas $H = a_1\xi^1 + a_3\xi^3 + ..... + a_n\xi^n$) (zapewnia to przyjęcie $a_0 = 0$ )

Przy tych założeniach wyrazy szeregu dla j<n spełniają relacje $a_{j+2} = \frac{(2j-2n)}{(j+2)(j+1)} a_j$

A zatem $H \underset{\xi \to \pm\infty}{\propto} \exp(\xi^2)$

czyli $\psi = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H \underset{\xi \to \pm\infty}{\propto} \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right)$

($H, \psi \to \infty$ dla $\xi \to \pm\infty$)

Żeby funkcja falowa była skończona trzeba przyjąć iż szereg potęgowy $H = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j$ urywamy na dowolnie wybranym wyrazie indeksowanym przez $j=n$ czyli $a_j = 0$ dla $j > n$.

Warunek powyższy będzie spełniony gdy

$$2n + 1 - \lambda = 0 \qquad (******)$$

(gdyż wówczas $a_{n+2} = \frac{(2n+1-\lambda)}{(j+2)(j+1)} a_n = 0$)

i ponadto $a_j = 0$ dla $j$ nieparzystego gdy $n$ parzyste

(wówczas $H = a_0\xi^0 + a_2\xi^2 + ..... + a_n\xi^n$) (zapewnia to przyjęcie $a_1 = 0$ )

lub $a_j = 0$ dla $j$ parzystego gdy $n$ nieparzyste

(wówczas $H = a_1\xi^1 + a_3\xi^3 + ..... + a_n\xi^n$) (zapewnia to przyjęcie $a_0 = 0$ )

Przy tych założeniach wyrazy szeregu dla j<n spełniają relacje $a_{j+2} = \frac{(2j-2n)}{(j+2)(j+1)} a_j$

A zatem $H \underset{\xi \to \pm\infty}{\propto} \exp(\xi^2)$

czyli $\psi = \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) H \underset{\xi \to \pm\infty}{\propto} \exp\left(\frac{\xi^2}{2}\right)$

( $H, \psi \to \infty$ dla $\xi \to \pm\infty$ )

Żeby funkcja falowa była skończona trzeba przyjąć iż szereg potęgowy $H = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j$ urywamy na dowolnie wybranym wyrazie indeksowanym przez $j=n$ czyli $a_j = 0$ dla $j > n$.

Warunek powyższy będzie spełniony gdy

$$2n + 1 - \lambda = 0 \qquad (******)$$

(gdyż wówczas $a_{n+2} = \frac{(2n+1-\lambda)}{(j+2)(j+1)} a_n = 0$)

i ponadto $a_j = 0$ dla $j$ nieparzystego gdy $n$ parzyste (wówczas $H = a_0 \xi^0 + a_2 \xi^2 + ..... + a_n \xi^n$) (zapewnia to przyjęcie $a_1 = 0$ )

lub $a_j = 0$ dla $j$ parzystego gdy $n$ nieparzyste (wówczas $H = a_1 \xi^1 + a_3 \xi^3 + ..... + a_n \xi^n$ ) (zapewnia to przyjęcie $a_0 = 0$ )

Przy tych założeniach wyrazy szeregu dla j<n spełniają relacje $a_{j+2} = \frac{(2j-2n)}{(j+2)(j+1)} a_j$

Z równania (******) wynika iż

$\lambda = 2n+1$ $\qquad$ $n$=0,1,2,3

czyli uwzględniając to iż $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ dozwolone energie oscylatora wyrażają się wzorem

$$E = \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1) = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right) \qquad n=0,1,2,\ldots$$

Wielomiany $H(\xi) = H_n(\xi)$ to wielomiany Hermite'a

Są one rozwiązaniami równania różniczkowego:

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0.$$

Można je wyznaczyć posługując się wzorem:

$$H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2)\frac{d^n}{d\xi^n}\left(\exp(-\xi^2)\right).$$

Spełniają one związek: $\int_{-\infty}^{\infty} H_m(\xi)H_n(\xi)\exp(-\xi^2)d\xi = \sqrt{\pi}\,2^n n!\,\delta_{mn}$.

Wybrane wielomiany Hermite'a:

$H_0 = 1$, $H_1 = 2\xi$, $H_2 = 4\xi^2 - 2$, $H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$.