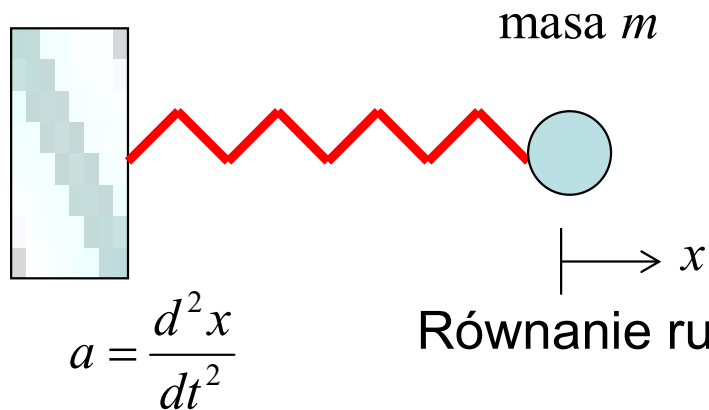


Kwantowy oscylator harmoniczny- podstawowe własności, porównanie z oscylatorem klasycznym

Klasyczny jednowymiarowy oscylator harmoniczny



Siła harmoniczna

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

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

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

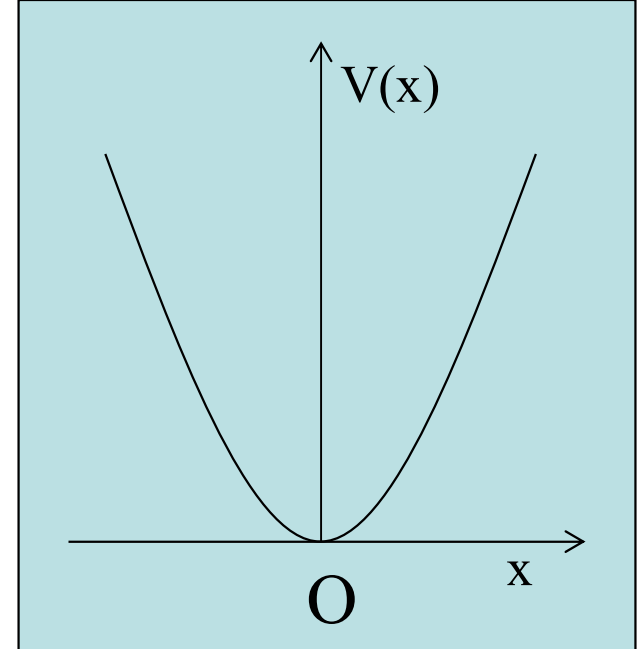
Amplitudę drgań A można uzależnić od całkowitej energii oscylatora $A = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$

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 zero co odpowiada $A=0$ czyli spoczynkowi w położeniu równowagi .

Jednowymiarowy oscylator harmoniczny

Oscylatorem nazywamy w ogólności układ, dla którego potencjał jest opisany funkcją kwadratową wychylenia z położenia klasycznego równowagi 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 (dwuatomowych)

Potencjał w jakim porusza się drgający atom wokół położenia równowagi $R=R_{eq}$ (w którym potencjał przyjmuje wartość minimalną) w cząsteczce można, gdy wychylenie atomu z położenia równowagi $x=R-R_{eq}$ jest nieduże, wyrazić przez potencjał oscylatora harmonicznego

$$V(R) = V(R_{eq}) + \left(\frac{dV}{dR} \right)_{R=R_{eq}} x + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dR^2} \right)_{R=R_{eq}} x^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{d^3V}{dR^3} \right)_{R=R_{eq}} x^3 + \dots \approx \frac{1}{2} \left(\frac{d^2V}{dR^2} \right)_{R=R_{eq}} x^2 = \frac{1}{2} kx^2$$

można przyjąć jako 0 dąży do 0 ozn. $= k$

(W praktyce opisując drgania w cząsteczce dwuatomowej można rozpatrzeć ruch pojedynczego ciała o masie zredukowanej wokół nieruchomego środka masy)

2) złożone kolektywne drgania atomów w kryształach 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:

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

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

Funkcje będące rozwiązaniem tego równania nie mogą nigdzie osiągać wartości nieskończonych co w rozważanym przypadku oznacza iż dla $x \rightarrow \pm\infty$ mamy $\psi \rightarrow 0$

Funkcje spełniające ten warunek można znaleźć tylko dla dyskretnej wartości energii E

Nie da się ich wyrazić 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.

(pełne rozwiązanie w dodatku dla osób zainteresowanych)

Zarys rozwiązania równania Schrödingera niezależnego od czasu

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

Wprowadzając bezwymiarową zmienną $\xi = \alpha x$ gdzie $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$

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

można równanie to zapisać w postaci bezwymiarowej

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

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

przy czym H poszukujemy w postaci szeregu $H = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j$

W postaci zapostulowanej można zapisać rozwiązanie analizowanego równania gdy spełnione gdy równanie rekurencyjne wiążące

współczynnik a_{j+2} szeregu ze współczynnikiem a_j :

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

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

A zatem $H, \psi \rightarrow \infty$ dla $\xi \rightarrow \pm\infty$

Żeby funkcja falowa była skończona trzeba szereg potęgowy $H = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \xi^j$ urwać na dowolnie wybranym

wyrazie indeksowanym przez $j=n$ co można osiągnąć wprowadzając dodatkowy warunek zapewniający to iż $a_j = 0$ dla $j > n$.

Warunek powyższy będzie spełniony gdy

$$2n + 1 - \lambda = 0$$

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

i ponadto $a_1=0$ gdy n parzyste

(wówczas $H = a_0 \xi^0 + a_2 \xi^2 + \dots + a_n \xi^n$)

lub $a_0=0$ gdy n nieparzyste

(wówczas $H = a_1 \xi^1 + a_3 \xi^3 + \dots + a_n \xi^n$)

Z równania $2n + 1 - \lambda = 0$ wynika iż

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

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

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

Wyniki rozwiązania równania Schrödinera

Dozwolone energie oscylatora

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n=0,1,2,\dots$$

Część zależna od zmiennej przestrzennej funkcji falowej odpowiadająca stanowi stacjonarnemu o energii E_n unormowana tak iż $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 dx = 1$ ma

postać:

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

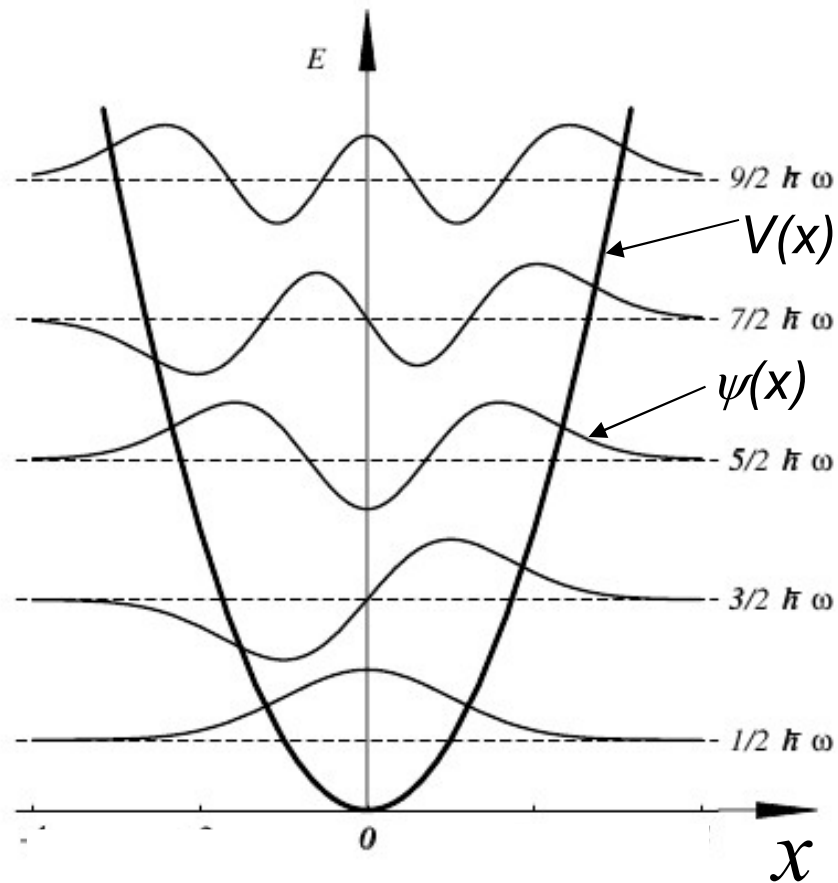
gdzie $H_n \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) = H_n(\xi)$ -wielomian Hermite'a, który można określić ze

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

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1; & H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 & H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \end{aligned}$$

Funkcja falowa opisująca oscylator w stanie stacjonarnym o energii E_n

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



Funkcja falowa wnika w obszar o $|x| > A$ w którym $E < V$ a więc cząstka według mechaniki klasycznej miałaby ujemną energię kinetyczną

Funkcja wykładniczo maleje w miarę wchodzenia w głąb obszaru klasycznie niedostępnego

W obszarze klasycznie dostępnym $|x| < A$ funkcja falowa oscyluje, przy czym liczba oscylacji rośnie ze wzrostem n czyli energii cząstki. Występuje n punktów w których funkcja falowa się zeruje.

Funkcje falowe są funkcjami parzystymi lub nieparzystymi tzn. spełniają relację

$$\psi(-x) = \pm \psi(x) \quad \text{co wynika m. in z tego iż} \quad V(-x) = V(x)$$

Kwantowy jednowymiarowy oscylator harmoniczny-podstawowe własności

- 1) Energia oscylatora może przyjmować tylko dyskretne wartości dane wzorem

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad n=0,1,2,\dots$$

Odległość w skali energii kolejnych dozwolonych poziomów energetycznych oscylatora jest stała i równa $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$

(założenie zgodne z założeniem Plancka dotyczącym kwantowaniem wymiany energii pomiędzy materią i promieniowaniem)

Uwaga. Brak obserwacji kwantowania energii w przypadku oscylatora

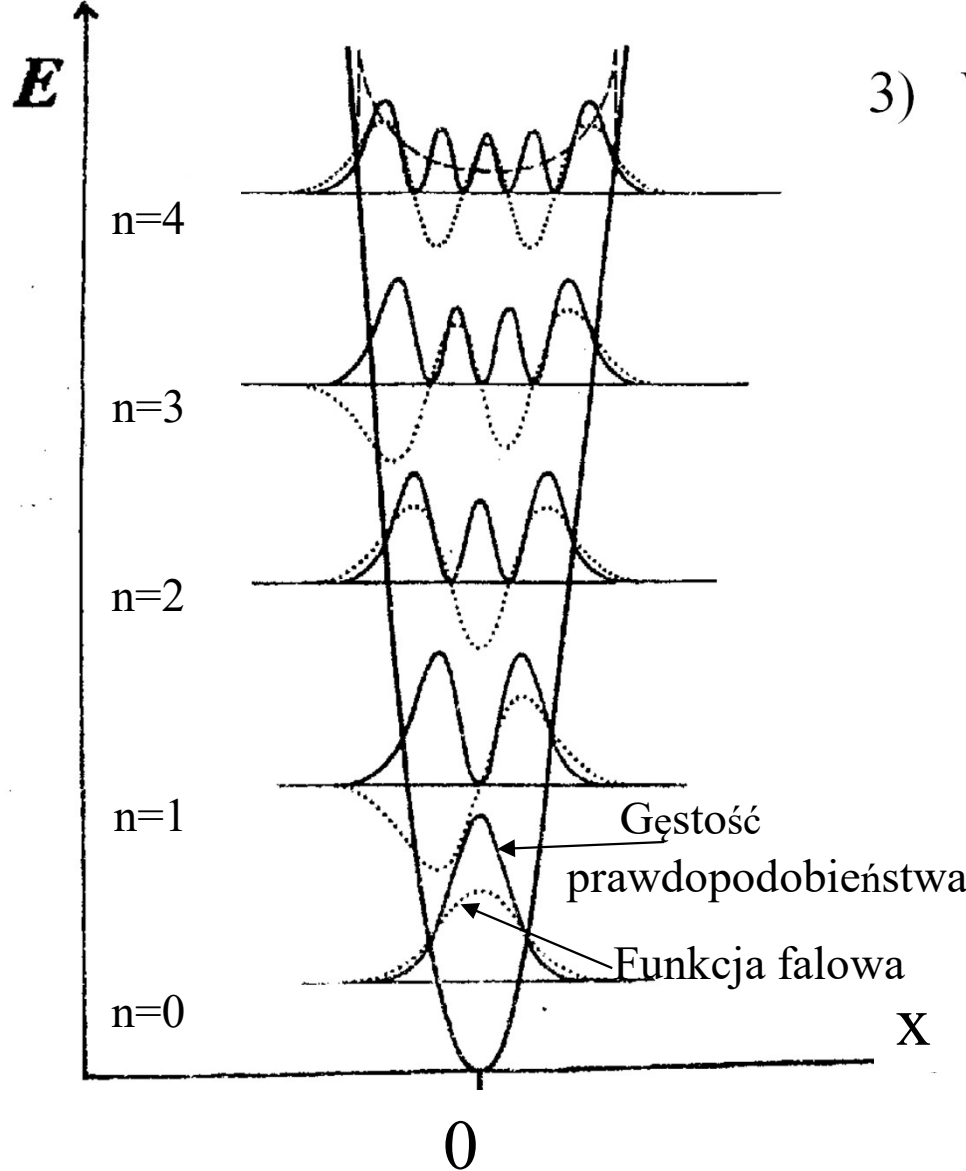
klasycznego wiąże się z faktem iż energia $\hbar\omega$ jest bardzo mała w stosunku do wartości energii jakie może zwykle taki oscylator posiadać.

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 $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ czyli oscylator nie może mieć energii równej zero.

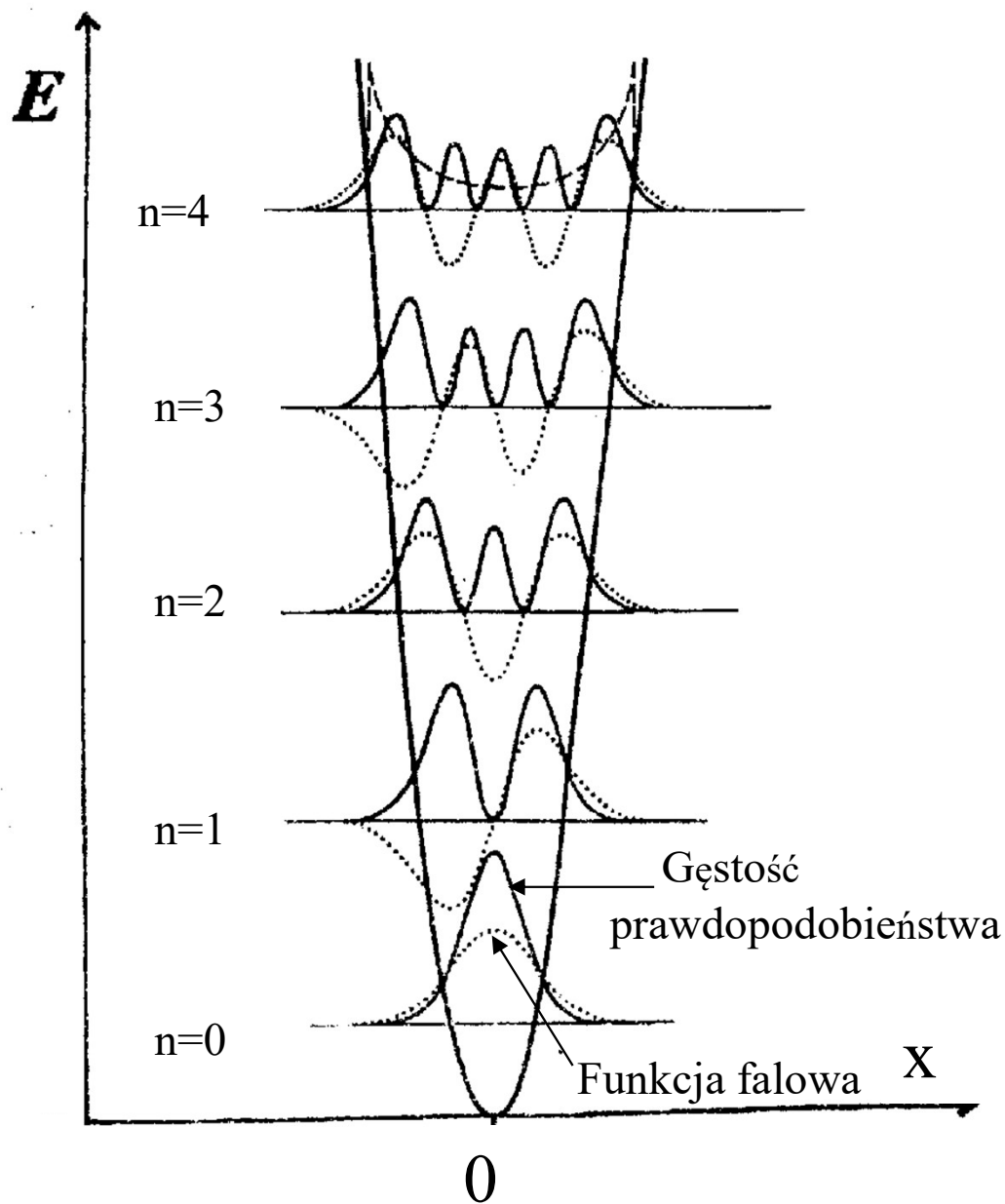
Gdyby oscylator miał energię równą zero, to znalazłbyśmy dokładnie jego pęd (równy $p=0$) oraz położenie $x=0$, co nie jest możliwe na mocy zasady nieoznaczoności.



- 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 będącym stanem własnym operatora Hamiltona) nie zależy od czasu i zależy od rozwiązania równania niezależnego do czasu

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

- 4) Istnieje skończone prawdopodobieństwo znalezienia cząstki poza obszarem klasycznie dostępnym $|x| > A$ przy czym gęstość prawdopodobieństwa monotonicznie maleje w miarę wchodzenia głębiej w obszar klasycznie niedostępny
- 5) W obszarze klasycznie dostępnym $|x| < A$ gęstość prawdopodobieństwa $\rho(x)$ oscyluje, przy czym liczba oscylacji rośnie ze wzrostem n . Występują punkty w których gęstość prawdopodobieństwa się zeruje (gdy $n \neq 0$).



6) W stanie podstawowym o $n=0$ największe prawdopodobieństwo znalezienia cząstki występuje dla $x \approx 0$ 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 $n \rightarrow \infty$, kiedy uśredniona po x funkcja gęstości prawdopodobieństwa znalezienia cząstki w przestrzeni jest zbliżona do gęstości określonej w mechanice klasycznej (przejaw zasady korespondencji).

Przykładowe pytania opisowe

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.

$$n = -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots$$

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

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

d) dowolną liczbą rzeczywistą?

Zaznaczyć poprawną odpowiedź.

2) Zakładając, iż A oznacza klasyczna amplitudę drgań oscylatora harmonicznego czyli cząstki poruszającej się potencjale $V = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ 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 różne od zera 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 zero w punktach dla których $-A < x < A$.

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.

3) 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) 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 może być równa zeru.
- f) Energia kwantowego oscylatora jest zawsze dodatnia.

Zaznaczyć wszystkie poprawne stwierdzenia.

Dodatek (dla zainteresowanych)

Rozwiązanie równania Schrödingera niezależnego od czasu dla jednowymiarowego oscylatora harmonicznego.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \psi = E \psi \quad V(x) = \frac{1}{2} k x^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$
$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} x^2 \psi = \frac{2mE}{\hbar^2} \psi \quad (*)$$

Wprowadzając bezwymiarową zmienną $\xi = \alpha x$

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

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

zauważając iż

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

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 $\psi = \psi(\xi)$

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

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

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

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

a jego przybliżone asymptotyczne rozwiązanie dla $\xi \rightarrow \pm\infty$ 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 ξ^2)

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

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

Ponieważ

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

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

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

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

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

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

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

to otrzymujemy

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

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

zmiana indeksu sumowania $j \rightarrow j+2$
w pierwszej sumie

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

(*****)

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

Równanie (*****) jest spełnione gdy wszystkie współczynniki stojące przy wyrazach ξ^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 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 $\xi \rightarrow \pm\infty$. Widać iż $\frac{a_{j+2}}{a_j} \xrightarrow{j \rightarrow \infty} \frac{2}{j}$ (szereg H jest rozbieżny)

Takim samym stosunkiem $\frac{a_{j+2}}{a_j}$ dla $j \rightarrow \infty$ charakteryzuje się rozwinięcie

w szereg funkcji $\exp(\xi^2) = 1 + \xi^2 + \frac{\xi^4}{2!} + \frac{\xi^6}{3!} + \dots$

dla którego $\frac{a_{j+2}}{a_j} = \frac{(j/2)!}{(j/2+1)!} = \frac{1}{j/2+1} \xrightarrow{j \rightarrow \infty} \frac{2}{j}$

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

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

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

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

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

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

i ponadto $a_1=0$ gdy n parzyste

(wówczas $H = a_0 \xi^0 + a_2 \xi^2 + \dots + a_n \xi^n$)

lub $a_0=0$ gdy n nieparzyste

(wówczas $H = a_1 \xi^1 + a_3 \xi^3 + \dots + a_n \xi^n$)

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

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

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

wyrażają się wzorem

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

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:

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

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:

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

Po unormowaniu funkcja falowa wyraża się wzorem

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