Федеральное агентство по образованию

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Рязанский государственный университет имени С.А. Есенина»

ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Лабораторная работа компьютерного моделирования

Рязань -2008

Федеральное агентство по образованию

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Рязанский государственный университет имени С.А. Есенина»

ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Лабораторная работа компьютерного моделирования

Рязань -2008

ББК 22.314

Г18

Печатается по решению редакционно-издательского совета Государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Рязанский государственный университет имени С.А. Есенина» в соответствии с планом изданий на 2008 год.

Рецензент А.Б. Ястребков, канд. физ.-мат. наук, доц.

Гармонический осциллятор в квантовой механике: лабораторная **Г18** работа компьютерного моделирования /сост. **А.П. Мелехов,** Ряз. гос. ун-т им. С.А. Есенина. — Рязань, 2008. — 16 с.

Излагается краткая теория квантового гармонического осциллятора и рассматриваются вопросы компьютерного моделирования его волновых функций. Предназначена для выполнения лабораторных работ по квантовой механике в компьютерном классе.

Ключевые слова: *квантовый осциллятор, волновая функция, плотность вероятности, полиномы Эрмита.*

ББК 22.314

[©] Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Рязанский государственный университет имени С.А. Есенина» 2008

ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ

§ 1. Квантовый гармонический осциллятор

В классической механике осциллятором называют материальную точку, потенциальная энергия которой определена функцией:

$$U(x) = \frac{kx^2}{2}, \quad \varepsilon \partial e \qquad k = \mu \omega^2. \tag{1.1}$$

Здесь μ — масса материальной точки, а ω — собственная частота колебаний.

B квантовой механике одномерным гармоническим осциллятором называют систему, описываемую Гамильтонианом $\overset{\,\,{}_\circ}{H}$:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2\mu} + \frac{\mu \omega^2 x^2}{2} \,. \tag{1.2}$$

Таким образом, квантово-механическая задача о гармоническом осцилляторе сводится к задаче о движении частицы в параболической потенциальной яме (1.1) и заключается в том, чтобы определить энергетический спектр и волновые функции такой системы. Другими словами требуется найти собственные значения и собственные функции оператора \hat{H} . Это значит, что необходимо решить уравнение Шредингера:

$$\hat{H}\psi = E\psi. \tag{1.3}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{\mu\omega^2}{2}x^2\psi = E\psi.$$
 (1.4)

Удобно ввести безразмерную переменную ξ , используя обозначения

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}, \quad \xi = \frac{x}{x_0}, \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}.$$
 (1.5)

В новых обозначениях уравнение Шредингера приобретает вид

$$\psi'' + (\lambda - \xi^2)\psi = 0. \tag{1.6}$$

Характерной особенностью данной задачи является то, что движение частицы не ограничено какой-либо непроницаемой стенкой. Поэтому у осциллятора нет граничных условий. Единственным требованием, которое налагается на волновую функцию, является требование ее квадратичной интегрируемости. Мы увидим, что уравнение Шредингера для осциллятора имеет решение, удовлетворяющее последнему требованию, только при некоторых вполне определенных значениях параметра λ .

Для того чтобы выяснить общий характер решений уравнения (1.6), рассмотрим асимптотическое поведение функции $\psi(\xi)$ при очень больших значениях аргумента $\xi >> \lambda$. При этом условии уравнение (1.6) принимает вид

$$\psi'' - \xi^2 \psi = 0. {(1.7)}$$

Асимптотическими решениями уравнения (1.7) при больших значениях ξ являются функции $\psi = e^{\pm \frac{\xi^2}{2}}$. Условие конечности волновой функции при $\xi = \pm \infty$ требуют выбрать из этого множества лишь $\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}}$. Исходя из этого результата, будем искать решение уравнения (1.6) в виде

$$\psi = e^{-\frac{\xi^2}{2}} f(\xi), \tag{1.8}$$

где $f(\xi)$ — новая неизвестная функция. Подставляя (1.8) в (1.6), приходим к следующему уравнению для функции $f(\xi)$

$$f'' - 2\xi f' + (\lambda - 1)f = 0. (1.9)$$

Будем искать решение этого уравнения в виде степенного ряда

$$f(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k \ . \tag{1.10}$$

Производные f'uf'' имеют вид

$$f' = \sum k a_k \xi^{k-1},$$

$$f'' = \sum k (k-1) a_k \xi^{k-2},$$
(1.11)

Подставляя ряды (1.11) в уравнение (1.9), получаем

$$\sum k(k-1) a_k \xi^{k-2} - 2\xi \sum k a_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1) \sum a_k \xi^k = 0.$$
 (1.12)

Из этого уравнения получаем рекуррентную формулу для коэффициентов a_n

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)}a_k. \tag{1.13}$$

Мы получим решение, удовлетворяющее необходимым условиям конечности только в том случае, если, если ряд (1.10) сведется к полиному, т.е. оборвется на каком-то члене. Так, предположим, что $a_n \neq 0$, $a_{k+2} = 0$. Тогда все последующие коэффициенты обратятся в нуль и функция $f(\xi)$ сведется к полиному $n-\tilde{u}$ степени. Такое предположение будет выполнено если

$$\lambda = 2n + 1,\tag{1.14}$$

где n – целое число, $n \ge 0$, так как n – это номер члена, на котором ряд обрывается. Подставляя эти значения λ в формулу (1.5) получаем:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{1.15}$$

Отсюда видно, что энергия осциллятора может принимать только дискретные значения. Причем уровни энергии расположены друг от друга на одинаковых расстояниях, равных $\hbar\omega$. Уровень, отвечающий значению n=0, называют основным, остальные — возбужденными.

§ 2. Волновые функции линейного гармонического осциллятора

Выпишем волновую функцию, отвечающую n- my возбужденному уровню энергии

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} f_n(\xi),$$
 (2.1)

где $f_n(\xi)$ — полином $n-\check{u}$ степени с коэффициентами, определяемыми рекуррентным соотношением (1.13), а A_n — множитель, определяемый условием нормировки. Полиномы $f_n(\xi)$ носят название полиномов Эрмита-Чебышева и обозначаются через $H_n(\xi)$. Полиномы Эрмита-Чебышева часто представляют в виде

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}.$$
 (2.2)

Полиномы Эрмита-Чебышева удовлетворяют дифференциальному уравнению

$$\frac{d^2 H_n}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH_n}{d\xi} + 2nH_n = 0, (2.3)$$

которое получается из уравнения (1.9) с учетом условия (1.14).

Для коэффициентов A_n , в результате вычисления нормировочного интеграла, получается выражение

$$A_n = \sqrt{\frac{1}{n!2^n \sqrt{\pi}}}. (2.4)$$

Вид волновых функций для некоторых квантовых чисел n указан на рис.1. Отметим, что волновая функция ψ_0 , отвечающая основному состоянию осциллятора n=0, нигде не обращается в нуль. Волновая функция ψ_1 , отвечающая уровню n=1, обращается в нуль один раз, $\psi_2-(n=2)$ обращается в нуль два раза и т.д. Точки, в которых волновая функция обращается в нуль, называются узлами волновой функции. Легко видеть, что число узлов волновой функции равно квантовому числу n.

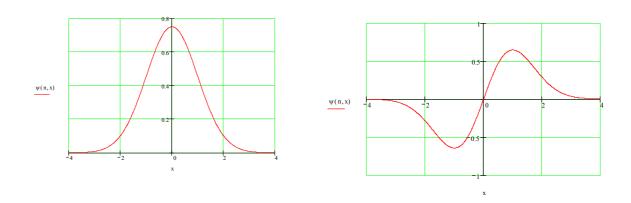


Рис.1. Волновые функции гармонического осциллятора: ψ_0 , ψ_1 .

Вероятность найти частицу в точке x, интервала dx равна

$$dW_n = \left| \psi_n(x) \right|^2 dx.$$

График плотности этой вероятности при n=0 изображен на рис.2. вместе с классической вероятностью, представленной пунктирной линией

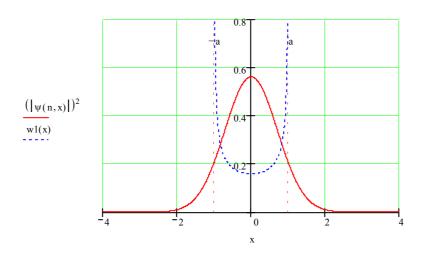


Рис.2. Плотность вероятности обнаружения частицы в интервале dx

Классическая вероятность определяется как отношение времени пребывания dt в окрестности данной точки к периоду движения. Она оказывается наибольшей вблизи точек поворота $x=\pm x_0$, в которых скорость движения обращается в нуль. Напротив, в окрестности точки x=0 частица имеет наибольшую скорость и вероятность ее обнаружения минимальна.

Из рассмотрения кривой рис.2. видно, что вероятность найти квантовую частицу отлична от нуля и в классически недоступной области за пределами точек поворота.

При больших квантовых числах (рис.3) в согласии с принципом соответствия квантовое распределение вероятности приближается к классическому.

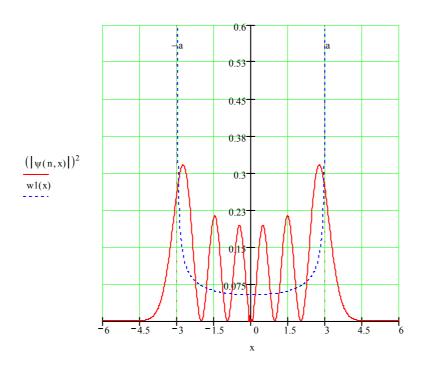


Рис.3. Плотность вероятности для классического и квантового осциллятора при n = 5.

В заключение отметим, что наименьшее возможное значение энергии осциллятора, равное $\frac{\hbar\omega}{2}$, отлично от нуля. Это означает, что квантовый осциллятор никогда не может находиться в состоянии абсолютного покоя. Это обстоятельство есть прямое следствие соотношения неопределенностей.

Экспериментально нулевая энергия E_0 наблюдается при рассеянии света кристаллом, находящимся при температуре, близкой к абсолютному нулю. При абсолютном нуле кристалл находится в основном энергетическом состоянии. Тем не менее, атомы совершают нулевые колебания, которые вызывают рассеяние света.

ПРАКТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

Моделирование волновых функций в среде Mathcad

- 1. Записать общий вид волновых функций одномерного квантового осциллятора.
- 2. Вычислить нормировочный множитель для полиномов Эрмита-Чебышева и для волновой функции в «х» представлении.
- 3. Выписать явный вид волновых функций для трех первых значений главного квантового числа и построить графики этих функций с использованием программы Mathcad.
- 4. Выполнить расчет вероятности найти частицу в области x, x+dx для *классического* осциллятора: (см. Д.И. Блохинцев. Основы квантовой механики. М.: Высш. шк., 1961. С.188).
- 5. Построить графики плотности вероятности для квантового и классического осцилляторов для значений квантового числа от 0 до 5.
- 6. Найти средние значения координаты и импульса частицы квантового осциллятора.
- 7. Найти вероятность обнаружения частицы квантового осциллятора, находящегося в основном состоянии, вне пределов классической области.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ:

- 1. Какие свойства квантовой частицы являются общими для прямоугольной потенциальной ямы и для параболической, а какие различными?
- 2. Каково принципиальное отличие минимальной энергии квантового осциллятора от минимальной энергии классического осциллятора?
- 3. Чем существенно отличаются плотности вероятности квантового и классического осциллятора?

ПРИЛОЖЕНИЕ

I. Вычисление нормировочного множителя для полиномов Эрмита-Чебышева

Напомним, что волновая функция (2.1), являющаяся решением уравнения (1.6), кроме стандартных условий конечности и непрерывности, должна быть квадратично интегрируемой и удовлетворять так называемому условию нормировки:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n(\xi) \psi_n^*(\xi) d\xi = 1. \tag{I.1}$$

Согласно (2.1) для $\Psi_n(\xi)$ имеем представление

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) , \qquad (I.2)$$

где

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}.$$
 (I.3)

С учетом выражений (І.2) и (І.3) условие нормировки принимает вид

$$A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = (-1)^n A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi) \frac{d^n \xi^{-\xi^2}}{d\xi^n} d\xi = 1.$$
 (I.4)

Будем вычислять этот интеграл по частям:

$$J = (-1)^{n} A_{n}^{2} \int_{-\infty}^{\infty} H_{n}(\xi) \frac{d^{n} e^{-\xi^{2}}}{d\xi^{n}} d\xi = \begin{vmatrix} H_{n}(\xi) = U, & dU = \frac{dH_{n}(\xi)}{d\xi} d\xi, \\ dV = \frac{d^{n} e^{-\xi^{2}}}{d\xi^{n}} d\xi, & V = \frac{d^{n-1} e^{-\xi^{2}}}{d\xi^{n-1}} \end{vmatrix} =$$

$$= (-1)^{n} A_{n}^{2} \cdot H_{n}(\xi) \cdot \frac{d^{n-1} e^{-\xi^{2}}}{d \xi^{n-1}} d \xi \Big|_{-\infty}^{\infty} +$$

$$+(-1)^{n-1} A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^{n-1} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n-1}} \cdot \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} d\xi.$$
 (I.5)

Первое слагаемое равно нулю, поэтому получаем

$$J = (-1)^{n-1} A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^{n-1} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n-1}} \cdot \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} d\xi.$$
 (I.6)

Интегрируем далее по частям еще раз

$$J = (-1)^{n-1} A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^{n-1} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n-1}} \cdot \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} d\xi = \begin{vmatrix} U = \frac{dH_n(\xi)}{d\xi}, & dU = \frac{d^2 H_n(\xi)}{d\xi^2} d\xi \\ dV = \frac{d^{n-1} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n-1}} d\xi, & V = \frac{d^{n-2} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n-2}} \end{vmatrix} =$$

$$= (-1)^{n-1} A_n^2 \frac{dH_n(\xi)}{d\xi} \cdot \frac{d^{n-2} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n-2}} \Big|_{-\infty}^{\infty} + (-1)^{n-2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^{n-2} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n-2}} \cdot \frac{d^2 H_n(\xi)}{d\xi^2} d\xi.$$

Первое слагаемое опять обращается в нуль. Поэтому получаем

$$J = (-1)^{n-2} A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^{n-2} e^{-\xi^2}}{d\xi^{n-2}} \cdot \frac{d^2 H_n(\xi)}{d\xi^2} d\xi.$$
 (I.7)

Выполняя интегрирование еще n-2 раза, мы придем к выражению

$$J = A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} d\xi.$$
 (I.8)

Производная n-20 порядка от полинома Эрмита-Чебышева равна

$$\frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} = 2^n n! \tag{I.9}$$

Это легко доказать, записав представление

$$H_n(\xi) = \sum_{k=0} a_k \xi^k , \qquad (I.10)$$

где

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-(2n+1)}{(k+2)(k+1)}a_k.$$
 (I.11)

Пусть k = n - 2, тогда

$$a_{n} = -\frac{1 \cdot 2^{2}}{n \cdot (n-1)} a_{n-2}.$$

$$a_{n-2} = -\frac{n \cdot (n-1)}{1!} \cdot 2^{-2} a_{n}.$$
(I.12)

Пусть k = n - 4, тогда

$$a_{n-2} = -\frac{2 \cdot 2^2}{(n-2)(n-3)} a_{n-4}.$$

$$a_{n-4} = -\frac{(n-2)(n-3)}{2 \cdot 2^2} a_{n-2}.$$
(I.13)

Подставив в последнюю формулу выражение a_{n-2} из (I.12), получим

$$a_{n-4} = \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{1 \cdot 2!} \cdot 2^{-4} a_n.$$
 (I.14)

Повторяя процедуру вычисления достаточное количество раз, находим представление всех коэффициентов через коэффициент a_n . Поэтому полином Эрмита $n-o\check{u}$ степени представляется в виде:

$$H_n(\xi) = a_n \left(\xi^n - \frac{n(n-1)}{1 \cdot 2^2} \xi^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{1 \cdot 2 \cdot 2^4} \xi^{n-4} + \dots \right).$$

Положив величину $a_n = 2^n$, окончательно получаем

$$H_n(\xi) = \left((2\xi)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2\xi)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{1 \cdot 2!} (2\xi)^{n-4} + \dots \right).$$

Последний член равен:

$$(-1)^{\frac{n}{2}} \frac{n!}{\left(\frac{n}{2}\right)!}$$
 при четном n , $(-1)^{\frac{n-1}{2}} \frac{n!}{\left(\frac{n-1}{2}\right)!} 2\xi$ при нечетном n .

Дифференцируя это выражение n раз, получаем формулу (9).

Таким образом,

$$J = A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \frac{d^n H_n(\xi)}{d\xi^n} d\xi = A_n^2 \cdot 2^n \cdot n! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi.$$
 (I.15)

Рассмотрим отдельно интеграл

$$J_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi .$$

Запишем два таких интеграла в разных обозначениях

$$J_1 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx$$
, $J_2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy$

Тогда

$$J_0^2 = J_1 \cdot J_2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2} dy = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(x^2 + y^2)} dx dy.$$

Для вычисления последнего интеграла перейдем к полярным координатам (ρ, φ) . Получим

$$J_0^2 = J_1 \cdot J_2 = \int_0^{2\pi} \int_0^{\infty} e^{-\rho^2} \rho d\varphi d\rho = \pi \int_0^{\infty} e^{-\rho^2} d(\rho^2) = -\pi e^{-\rho^2} \Big|_0^{\infty} = \pi.$$

Отсюда ясно, что

$$J_0 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} \ . \tag{I.16}$$

С учетом этого результата, для интеграла (15) получаем

$$J = A_n^2 \cdot 2^n \cdot n! \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} d\xi = A_n^2 \cdot 2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}.$$
 (I.17)

Тогда, согласно условию нормировки, имеем

$$A_n^2 \cdot 2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi} = 1. \tag{I.18}$$

Отсюда находим искомый нормировочный множитель

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}}. (I.19)$$

Если волновая функция задана в *«х»* представлении, где $x = x_0 \xi$, тогда нормировочный множитель

$$\tilde{A}_n = \frac{1}{\sqrt{x_0 \, 2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}}.\tag{I.20}$$

Поэтому окончательно, волновая функция в (xx) представлении может быть записана так

$$\psi_{n}(x) = \frac{1}{\sqrt{x_{0} 2^{n} \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}} e^{-\frac{\xi^{2}}{2}} H_{n}(\xi).$$
 (I.21)

II. Плотность вероятности для классического осциллятора

Классическая вероятность $\omega_{\kappa n}(x)dx$ найти частицу в области x, x+dx определяется как отношение времени пребывания dt в окрестности данном отрезке к периоду движения. Если период колебаний $T=2\pi/\omega_0$, то

$$\omega_{_{\kappa_{n}}}(x)dx = \frac{dt}{T} = \frac{\omega_{_{0}}}{2\pi} \frac{dx}{9}.$$
 (II.1)

где g – скорость частицы. Выразим g как функцию x . Имеем

$$x = a \sin \omega_0 t . (II.2)$$

где а – амплитуда колебаний

$$a = \sqrt{\frac{2E}{\mu\omega_0^2}} \ . \tag{II.3}$$

Из (II.2) имеем

$$\mathcal{G} = a\omega_0 \cos \omega_0 t = a\omega_0 \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}.$$
 (II.4)

Поэтому

$$\omega_{\kappa n}(x)dx = \frac{dt}{T} = \frac{1}{2\pi a} \frac{dx}{\sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}}.$$
 $-a \le x \le a.$ (II.5)

Наибольшая вероятность приходится на точки поворота $x = \pm a$.

Функция

$$\omega_{\kappa n}(x) = \frac{1}{2\pi a \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}}. -a \le x \le a$$
 (II.6)

представляет собой плотность вероятности обнаружения классической частицы на отрезке [x, x+dx].

График этой функции легко построить с использованием средств Mathcad:

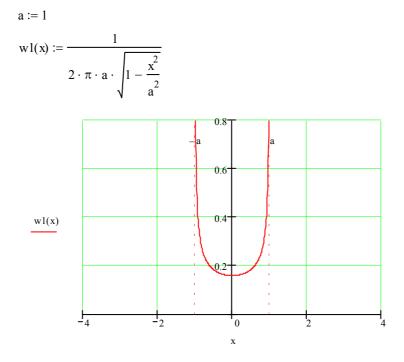


Рис. II.1.Плотность вероятности для классического осцилятора

СПИСОК РЕКОМЕНДУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- 1. Блохинцев Д.И. Основы квантовой механики. М.: Высшая школа, 1961.
- 2. Бом Д. Квантовая теория. М.: Физматгиз, 1961.
- 3. Борн M., Вольф Э. Основы оптики. M.: Hayкa, 1973.
- 4. Боум А. Квантовая механика. M.: Мир, 1990.
- 5. Давыдов А.С. Квантовая механика. М.: Физматгиз, 1968.
- 6. Дирак П.А.М. Принципы квантовой механики. М.: Наука, 1980.
- 7. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1978.
- 8. Матвеев А.Н Атомная физика. М.: Высшая школа, 1989.
- 9. Мессиа А. Квантовая механика. Т.1,2.-М.: Наука,1978.
- Савельев Н.В. Основы теоретической физики. Т.2.Квантовая механика. М.: Наука, 1977.

- 11. Сивухин Д.В. Общий курс физики.Т.5. Атомная физика. М.: Наука, 1986.
- 12. Фок В.А. Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976.
- 13. Шпольский Э.В. Атомная физика.Т.1,2.-М.: Наука,1974.

Учебно-методическое издание

ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Лабораторная работа компьютерного моделирования

Составитель Мелехов Александр Петрович

Редактор *Е.Н. Захарова* Технический редактор *В.В. Дмитриева*

Подписано 11.03.08. Поз. № 022. Бумага газетная. Формат 60х84 1/16. Гарнитура Times New Roman. Печать трафаретная. Усл. печ. л. 0,93. Уч.-изд. л. 0,9. Тираж 100 экз. Заказ №122.

Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Рязанский государственный университет имени С.А. Есенина» 390000, г. Рязань, ул. Свободы, 46

Редакционно-издательский центр РГУ 390023, г. Рязань, ул. Урицкого, 22