ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИТМО»

Проектная работа

по дисциплине «Дополнительные главы физики»

по теме «Исследование квантового гармонического осциллятора»

выполнили студенты

группы №M32071

Апальков Даниил

Иванов Анатолий

Хохлова Анна Андреевна

преподаватель:

Ефремова Екатерина Александровна

2021 год

Оглавление

Вступление. 3
- **Что такое осциллятор?** 3
- **Гармонический осциллятор в квантовой механике.** 3
- **Отличия квантового осциллятора от классического.** 3

Теоретические расчёты. 4
- **Квантово-механическая задача о гармоническом осцилляторе.** 4
- **Волновые функции линейного гармонического осциллятора.** 4

Практическая часть. 5

Вывод и анализ результатов работы. 14

Вступление.

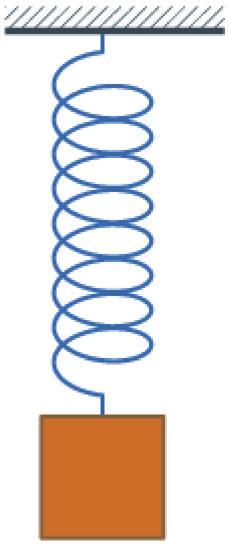
Что такое осциллятор?

Осциллятор – это маятник в более широком смысле слова, то есть любая система, совершающая периодические колебания. Собственно, именно для изучения колебаний он и используется.

Гармонический осциллятор (в классической механике) – система, которая при выведении её из положения равновесия испытывает действие возвращающей силы F, пропорциональной смещению x:

$$F = -kx$$

где k – постоянный коэффициент.



Если имеется ещё и сила трения (затухание), пропорциональная скорости движения (вязкое трение), то такую систему называют **затухающим** или **диссипативным осциллятором**. Если трение не слишком велико, то система совершает почти периодическое движение – синусоидальные колебания с постоянной частотой и экспоненциально убывающей амплитудой. Частота свободных колебаний затухающего осциллятора оказывается несколько ниже, чем у аналогичного осциллятора без трения.

Если осциллятор предоставлен сам себе, то говорят, что он совершает свободные колебания. Если же присутствует внешняя сила (зависящая от времени), то говорят, что осциллятор испытывает вынужденные колебания.

Механическими примерами гармонического осциллятора являются математический маятник (с малыми углами отклонения), груз на пружине (на изображении), торсионный маятник и акустические системы. Среди немеханических аналогов гармонического осциллятора можно выделить электрический гармонический осциллятор.

Гармонический осциллятор в квантовой механике.

Гармонический осциллятор в квантовой механике представляет собой квантовый аналог простого гармонического осциллятора. При этом рассматривают не силы, действующие на частицу, а гамильтониан, то есть полную энергию гармонического осциллятора, причём потенциальная энергия предполагается квадратично зависящей от координат. Учёт следующих слагаемых в разложении потенциальной энергии по координате ведёт к понятию ангармонического осциллятора.

Отличия квантового осциллятора от классического.

- Энергии (амплитуды), принимаемые частицей, дискретны (квантованы).
- Частица может проникать за стенки ямы (туннелировать).
- Состояние с минимальной энергией ненулевое и может совершать «нулевые колебания».
- Наличие «пустых» зон.

Теоретические расчёты.

Квантово-механическая задача о гармоническом осцилляторе.

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

$$U(x) = \frac{kx^2}{2}, \text{где } k = \mu\omega^2$$

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

В квантовой механике одномерным гармоническим осциллятором называют систему, описываемую Гамильтонианом $\widehat{H}$:

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p_x^2}}{2\mu} + \frac{\mu\omega^2 x^2}{2}$$

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

$$\widehat{H}\psi = E\psi$$

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

Удобно ввести безразмерную переменную ξ, используя обозначения

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$$

$$\xi = \frac{x}{x_0}$$

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

Волновые функции линейного гармонического осциллятора.

Практическая часть.

Моделирование волновых функций гармонического осциллятора.

1. Записать общий вид волновых функций одномерного квантового осциллятора

$\psi(n,\xi) := A_n \cdot e^{\frac{-\xi^2}{2}} \cdot H(n,\xi)$ - волновая функция, отвечающая n-ому возбужденному уровню энергии, где $H(n,\xi,d) := (-1)^n \cdot e^{\xi^2} \cdot d^n \cdot \frac{e^{-\xi^2}}{d \cdot \xi^n}$ - полином Эрмита-Чебышева n-ой степени, а A_n - нормировочный множитель

2. Вычислить нормировочный множитель для полиномов Эрмита-Чебышева и для волновой функции в "x" представлении

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(\xi, n) \times \psi'(\xi, n)\, d\xi \equiv 1$$ - условие нормировки

С применением выражений для волновой функции и полинома Эрмита-Чебышева из пункта 1 нормировочный интеграл приобретает следующий вид

$$\left(A_n\right)^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \cdot \left(H_n\right)^2(\xi)\, d\xi \equiv (-1)^n \cdot \left(A_n\right)^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \cdot H_n(\xi) \cdot \frac{d^n}{d\xi^n} \xi^{-\xi^2}\, d\xi \cdot (2.1)$$

Интеграл 2.1 равен 1. Выполняя интегрирование по частям n раз приходим к выражению

$$\left(A_n\right)^2 \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} \cdot \frac{d^n}{d\xi^n} H(n, \xi)\, d\xi \cdot (2.2)$$

Производная n-ого порядка от полинома Эрмита-Чебышева равна $\frac{d^n}{d\xi^n} H(n, \xi) \equiv 2^n n!$

Поэтому интеграл 2.2 принимает вид $\left(A_n\right)^2 \cdot 2^n \cdot n! \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}\, d\xi$

Рассмотрим отдельно интеграл $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2}\, d\xi$ Запишем его в разных обозначениях

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

Тогда $J_0^2 = J_1 * J_2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2}\, dx \cdot \int_{-\infty}^{\infty} e^{-y^2}\, dy = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\left(x^2+y^2\right)}\, dx\, dy \cdot (2.3)$

В полярных координатах (ρ, φ) интеграл 2.3 принимает вид

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} e^{-\rho^2} \cdot \rho\, d\varphi\, d\rho \equiv \pi \cdot \int_0^{\infty} e^{-\rho^2}\, d\left(\rho^2\right) = -\pi \cdot \frac{1}{e^{\infty^2}} - (-\pi) \cdot e^{-0^2} = \blacksquare \cdot \pi$$

В итоге для интеграла 2.2 получаем $\left(A_n\right)^2 \cdot 2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi} = \blacksquare \cdot 1$ Отсюда $A_n = \dfrac{1}{\sqrt{2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}}$

A_n в "x" представлении где $x = x_0 * \xi$: $\overline{A}_n \equiv \dfrac{1}{\sqrt{x_0 2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}}$

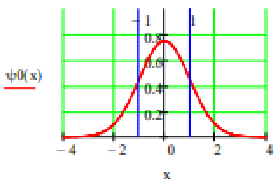
3. Выписать явный вид волновых функций для трех первых значений главного квантового числа и построить графики этих функций с использованием программы Mathcad.

3. Явный вид волновых функций и графики

Результаты($x_0 = 1$)

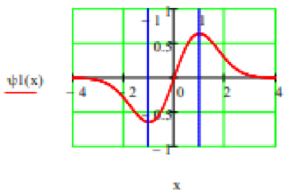
при n = 0

$$\psi0(x) := 1 \cdot e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}}}$$



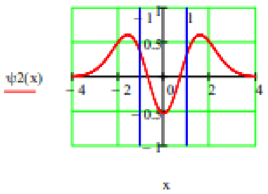
при n = 1

$$\psi1(x) := 1 \cdot e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot 2 \cdot x \cdot \sqrt{\frac{1}{2 \cdot \sqrt{\pi}}}$$



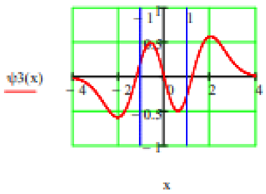
при n=2

$$\psi2(x) := 1 \cdot e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot \left(4 \cdot x^2 - 2\right) \cdot \sqrt{\frac{1}{8 \cdot \sqrt{\pi}}}$$



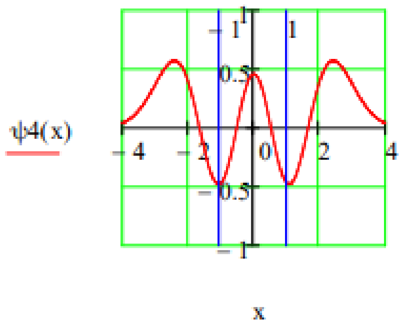
при n=3

$$\psi3(x) := e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot \left(8 \cdot x^3 - 12 \cdot x\right) \cdot \sqrt{\frac{1}{48 \cdot \sqrt{\pi}}}$$



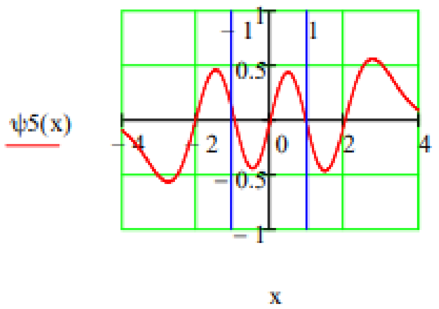
при n = 4

$$\psi4(x) := e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot \left(16 \cdot x^4 - 48 \cdot x^2 + 12\right) \cdot \sqrt{\frac{1}{4! \cdot 2^4 \cdot \sqrt{\pi}}}$$



при n=5

$$\psi5(x) := e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot \left(32 \cdot x^5 - 160 \cdot x^3 + 15 \cdot 8 \cdot x\right) \cdot \sqrt{\frac{1}{5! \cdot 2^5 \cdot \sqrt{\pi}}}$$



Вычисления для первых трех значений главного квантового числа n

1) n = 0

Имеем волновую функцию ψ из (1), нормировочный коэффициент a_0 из (2) и полином Эрмита-Чебышева H(ξ) для n = 0:

$$\psi(x) \equiv a_0 \cdot e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot H_0 x \qquad a_0 := \sqrt{\frac{1}{0! \cdot 2^0 \cdot \sqrt{\pi}}} \qquad H_0 := (-1)^0 \cdot e^{x^2} * \text{dif}(0,x)$$

$$\text{dif}(0,x) := \frac{d^0 \cdot e^{-x^2}}{d \cdot x^0}$$

dif(0,x) соответствует производной нулевого порядка от функции => самой функции

$$\text{dif}(0,x) := e^{-x^2}$$

Следовательно для полинома Эрмита-Чебышева получаем:

$$H_0 := e^{x^2} \cdot e^{-x^2} \quad \Rightarrow \quad H_0 \equiv 1$$

В итоге волновая функция для главного квантового числа равного 0 имеет вид

$$\psi(x) \equiv \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}}} \cdot e^{\frac{-x^2}{2}}$$

2) n = 1

Имеем волновую функцию ψ из (1), нормировочный коэффициент a_0 из (2) и полином Эрмита-Чебышева H(ξ) для n = 1:

$$\psi(x) \equiv a_1 \cdot e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot H_1 x \qquad a_1 := \sqrt{\frac{1}{1! \cdot 2^1 \cdot \sqrt{\pi}}} \qquad H_0 := (-1)^1 \cdot e^{x^2} * \text{dif}(1,x)$$

$$\text{dif}(1,x) := \frac{d \cdot e^{-x^2}}{d \cdot x}$$

dif(1,x) соответствует производной первого порядка

$$\text{dif}(1,x) := -2e^{-x^2} \cdot x$$

Следовательно для полинома Эрмита-Чебышева получаем:

$$H_0 := (-1) \cdot e^{x^2} \cdot (-2) \cdot x \cdot e^{-x^2} \quad \Rightarrow \quad H_0 \equiv 2 \cdot x$$

В итоге волновая функция для главного квантового числа равного 1 имеет вид

$$\psi(x) \equiv \sqrt{\frac{1}{2\sqrt{\pi}}} \cdot e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot 2 \cdot x$$

2) n = 2

Имеем волновую функцию ψ из (1), нормировочный коэффициент a_0 из (2) и полином Эрмита-Чебышева H(ξ) для n = 2:

$$\psi(x) \equiv a_2 \cdot e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot H_2 x \qquad a_2 := \sqrt{\frac{1}{2! \cdot 2^2 \cdot \sqrt{\pi}}}$$

$$dif(2,x) := \frac{d^2 \cdot e^{-x^2}}{d \cdot x^2}$$

dif(2,x) соответствует производной второго порядка

$$dif(2,x) := \left(4 \cdot x^2 - 2\right) e^{-x^2}$$

Следовательно для полинома Эрмита-Чебышева получаем:

$$H_0 := e^{x^2} \cdot \left(4 \cdot x^2 - 2\right) \cdot e^{-x^2} \quad \Rightarrow \quad H_0 \equiv 4 \cdot x^2 - 2$$

В итоге волновая функция для главного квантового числа равного 2 имеет вид

$$\psi(x) \equiv \sqrt{\frac{1}{8\sqrt{\pi}}} \cdot e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot \left(4 \cdot x^2 - 2\right)$$

4. Вероятность найти частицу в интервале от x до x + dx

4. Вероятность найти частицу в интервале от x до x+dx

Классическая вероятность $w_{кл}(x)dx := \frac{dt}{T}$ найти частицу в области [x, x+dx] определяется как отношение времени пребывания dt в окрестности данного отрезка к периоду движения.

Если $T = \frac{2\pi}{w_0}$ то $w_{кл}(x)dx := \frac{w_0 \cdot dx}{2\pi \cdot \delta}$ Можно выразить скорость частицы δ как функцию x:

$x := a \cdot \sin(w_0 \cdot t)$, $a := \sqrt{\frac{2 \cdot E}{\mu \cdot (w_0)^2}}$ - амплитуда колебаний. В результате имеем:

$\delta = a \cdot w_0 \cdot \cos(w_0 \cdot t)$ => $\delta = a \cdot w_0 \cdot \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}$

Поэтому $w_{кл}(x)dx := \frac{dx}{2 \cdot \pi \cdot a \cdot \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}}$ Следовательно $w_{кл}(x) := \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot a \cdot \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}}$

Мы нашли плотность вероятности обнаружить частицу на интервале от x до x+dx.
Найдем саму вероятность, проинтегрировав выражение $dW_n = w_{кл}(x)dx$:

$$\int 1\, dW_n = \int w_{кл}(x)\, dx \quad \to \quad W_n = \int \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot a \cdot \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}} dx \quad = \quad \{u = x/a,\ dx = a du\} =$$

$$= \frac{1}{2 \cdot \pi} \cdot \int \frac{1}{\sqrt{1 - u^2}} du = \frac{\arcsin(u)}{2 \cdot \pi} \quad = \quad \frac{\arcsin\left(\frac{x}{a}\right)}{2 \cdot \pi} + C$$

Если считать что a = 1 то

$$W_n = \frac{\arcsin(x)}{2 \cdot \pi}$$

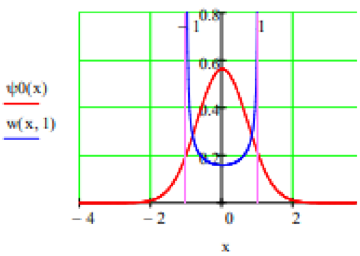
5. Графики плотности вероятности

Функция плотности вероятности для классического осцилятора нам известна. Найдем теперь функцию плотности вероятности для квантового осцилятора как квадрат модуля волновой функции: $|\psi_n(x)|^2$

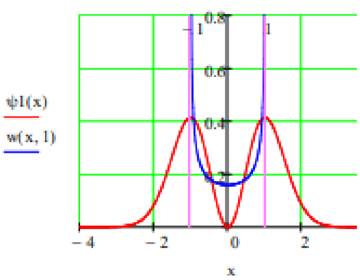
$(x_0 = 1)$

$$w(x, a) = \frac{1}{2 \cdot \pi \cdot a \cdot \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}}}$$

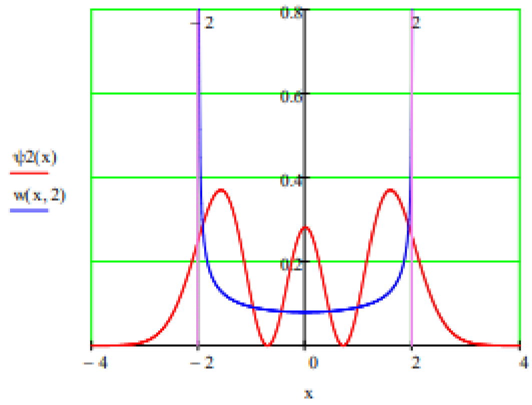
$$\psi 0(x) = \left(\left| 1 \cdot e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot \sqrt{\frac{1}{\sqrt{\pi}}} \right| \right)^2$$ при n = 0



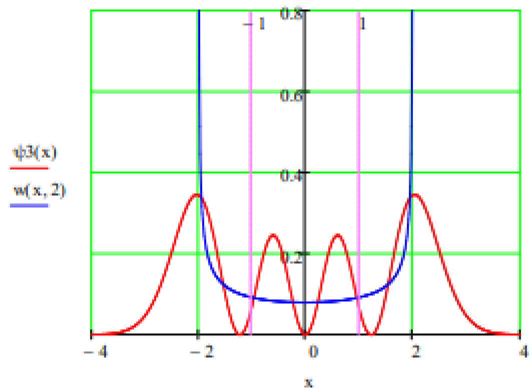
$$\psi 1(x) = \left(\left| 1 \cdot e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot 2 \cdot x \cdot \sqrt{\frac{1}{2 \cdot \sqrt{\pi}}} \right| \right)^2$$ при n = 1



$$\psi2(x) := \left[\left|1\cdot e^{\frac{-x^2}{2}}\cdot\left(4\cdot x^2 - 2\right)\cdot\sqrt{\frac{1}{8\cdot\sqrt{\pi}}}\right|\right]^2$$ при n=2

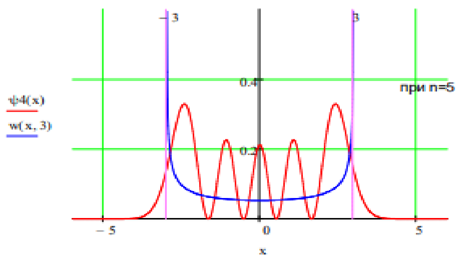


$$\psi3(x) := \left[\left|e^{\frac{-x^2}{2}}\cdot\left(8\cdot x^3 - 12\cdot x\right)\cdot\sqrt{\frac{1}{48\cdot\sqrt{\pi}}}\right|\right]^2$$ при n=3



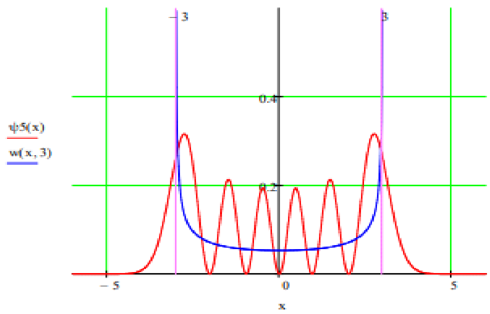
при n = 4

$$\psi4(x) := \left[\left|e^{\frac{-x^2}{2}}\cdot\left(16\cdot x^4 - 48\cdot x^2 + 12\right)\cdot\sqrt{\frac{1}{4!\cdot 2^4\cdot\sqrt{\pi}}}\right|\right]^2$$



при n=5

$$\psi5(x) := \left[\left|e^{\frac{-x^2}{2}}\cdot\left(32\cdot x^5 - 160\cdot x^3 + 15\cdot 8\cdot x\right)\cdot\sqrt{\frac{1}{5!\cdot 2^5\cdot\sqrt{\pi}}}\right|\right]^2$$



6. Средние значения импульса и координаты

Общий вид волновой функции исходя из предыдущих пунктов

$$\psi(x) = \frac{1 \cdot e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot H(n,x)}{\sqrt{x_0 \cdot 2^n n! \cdot \sqrt{\pi}}} \qquad \text{где } H(n,x) = (-1)^n \cdot e^{x^2} \cdot \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$$

Среднее значение координаты найдем с помощью интеграла следующего вида

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi'(x) \cdot \psi(x) \cdot x \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-x^2} \cdot H(n,x)^2}{x_0 \cdot 2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}} \cdot x \, dx$$

Посчитав значение данного интеграла для n = 0, ... 5 мы убедились что среднее значение координаты для квантового гармонического осцилятора равно нулю. Пример для n = 5

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{x^2} \cdot e^{x^2} \cdot 64 \cdot e^{-3x^2} \cdot \left(4x^4 - 20x^2 + 15\right)^2 \cdot x^3}{2^5 \cdot 5! \cdot \sqrt{\pi}} dx = \cdot 0$$

Итог <x> = 0

Среднее значение импульса найдем с помощью интеграла следующего вида

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi'(x) \cdot \psi(x) \cdot p \, dx = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot H(n,x)}{\sqrt{x_0 \cdot 2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}} \cdot \frac{e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot H(n,x) \cdot d \cdot -i \cdot \bar{h}}{\sqrt{x_0 \cdot 2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi} \cdot dx}} dx$$

Посчитав значение данного интеграла для n = 0, ... 5 мы убедились что среднее значение импульса для квантового гармонического осцилятора равно нулю. Пример для n = 2

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot \left(5x - 2x^3\right)}{\sqrt{2} \cdot \sqrt[4]{\pi}} \cdot \frac{e^{\frac{-x^2}{2}} \cdot e^{-x^2} \cdot e^{x^2} \left(4x^2 - 2\right) \cdot -i \cdot \bar{h}}{\sqrt{8 \cdot \sqrt{\pi}}} dx = -i \cdot \bar{h} \cdot 0 = \cdot 0$$

Итог <p> = 0

7. Найти вероятность обнаружения частицы квантового осциллятора, находящегося в основном состоянии, вне пределов классической области.

7. Найти вероятность обнаружения частицы квантового осциллятора, находящегося в основном состоянии, вне пределов классической области.

Поскольку осциллятор находится в основном состоянии, его энергия равна $E_0 = \frac{\bar{h} \cdot w_0}{2}$

а волновая функция имеет вид $\psi_0(x) = \frac{e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}}{\sqrt{x_0 \cdot \sqrt{\pi}}}$ где $x_0 = \sqrt{\frac{\bar{h}}{m_0 \cdot w_0}}$

При максимальном отклонении классического осциллятора от положения равновесия его полная энергия должна быть равна потенциальной энергии, т.е.

$$\frac{k \cdot (a_0)^2}{2} = \frac{\bar{h} \cdot w_0}{2}$$

Отсюда следует, что амплитуда классических колебаний

$$a_0 = \sqrt{\frac{\bar{h} \cdot w_0}{k}} = \sqrt{\frac{\bar{h}}{w_0 \cdot m_0}} = x_0$$

Найдем вероятность обнаружения частицы в классической области

$$P_{кл} = \int_{-a_0}^{a_0} \left[\left|\psi_0(x)\right|\right]^2 dx = \int_{-a_0}^{a_0} \frac{e^{-\left(\frac{x}{x_0}\right)^2}}{x_0 \cdot \sqrt{\pi}} dx = \int_{-1}^{1} \frac{e^{-y^2}}{\sqrt{\pi}} dy \leftarrow y = \frac{x}{x_0}$$

Поскольку под интегралом стоит четная функция переменной y, то

$$Pkl := \int_0^1 \frac{e^{-y^2} \cdot 2}{\sqrt{\pi}} dy$$

Соответственно, вероятность того, что частица будет обнаружена вне классической области, равна

$P := 1 - Pkl \qquad P = 0.157$

Таким образом, вероятность обнаружения частицы гармонического осциллятора, находящегося в основном состоянии, вне пределов классической области составляет ~ 16 %, т.е. имеет заметную величину.

Вывод и анализ результатов работы.