ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Мухтаров Эркин Кобилжонович
Андижанский государственный университет имени З.М.Бабура, и.о. доцент кафедры физики
https://orcid.org/0009-0001-5057-4905

Аннотация: Решение задачи нахождения волновой функции, описывающей состояние линейного квантового гармонического осциллятора, представляет значительные математические трудности. Автором разработан компьютерная программа вычисления полинома Чебышева-Эрмита, являющихся решением уравнения Шредингера для квантового осциллятора. Программа позволяет графически представить волновую функцию и распределение плотности вероятности.

Ключевые слова: уравнение Шрёдингера, компьютерное моделирование, линейный квантовой гармонический осциллятор, волновая функция, плотность вероятности.

HARMONIC OSCILLATOR IN QUANTUM MECHANICS

Mukhtarov Erkin Kobilzhonovich
Andijan State University named after Z.M.Babur

Abstract: Solving the problem of finding the wave function that describes the state of a linear quantum harmonic oscillator presents significant mathematical difficulties. The author has developed a computer program for calculating Chebyshev–Hermite polynomials, which are the solution of the Schrodinger equation for a quantum oscillator. The program allows you to graphically represent the wave function and the probability density distribution.

Key words: Schrodinger equation, computer simulation, quantum harmonic oscillator, wave function, probability density.

KVANT MEXANIKASIDAGI GARMONIK OSSILLYATOR

Muxtarov Erkin Kobiljonovich
Z.M.Bobur nomidagi Andijon davlat universiteti,
Fizika kafedrasi dotsenti v.b.

Annotatsiya: Chiziqli kvant garmonik ossillyatorining holatini tavsiflovchi to'lqin funksiyasini topish masalasini hal qilish muhim matematik qiyinchiliklarni keltirib chiqaradi. Muallif kvant ossillyatori uchun Shredinger tenglamasining yechimi bo'lgan Chebishev-Germit ko'phadini hisoblash uchun kompyuter dasturini ishlab chiqdi. Dastur to'lqin funksiyasini va ehtimollik zichligi taqsimotini grafik tarzda ifodalash imkonini beradi.

Kalit so'zlar: Shredinger tenglamasi, kompyuter simulyatsiyasi, chiziqli kvant garmonik ossillyator, to'lqin funksiyasi, ehtimollik zichligi.

ВВЕДЕНИЕ. Специфика изучения квантово-механических явлений и понятийного аппарата квантовой теории диктует необходимость использования имитационно-моделирующего программного обеспечения в процессе обучения основам квантовой механики. Особенности использования имитационно-моделирующего программного обеспечения в процессе обучения основам квантовой механики, прежде всего, характеризуются самой областью изучения, своеобразием и особенностями квантовой теории [1].

Имитационно-моделирующее программное обеспечение играет большую роль в фундаментальных исследованиях. Обращая внимание на развитие физики за последние годы, следует отметить, что многих статьях и докладах научных конференциях все большее сообщений широко используют результаты имитационного моделирования. Одной из причин расширения области применения в научных исследованиях моделирования, и численного эксперимента в частности, является быстрое развитие компьютерной техники и соответственно повышение возможностей используемого программного обеспечения.

ЛИТЕРАТУРА И МЕТОД. Задачи линейного гармонического осциллятора занимает важное место в теоретической физике, поскольку эта модель используется практически на всех разделах физики. На основе этой модели изучаются простые колебания, возникающие в механике, электродинамике, радиофизике, оптике, атомной и ядерной физике.

Причина использования этой модели в квантовой механике заключается в том, что, решением уравнение Шредингера, можно объяснить излучение абсолютно черного тела, теплоемкость твердых тел и многоатомных молекул и их спектры.

Модель гармонического осциллятора играет важную роль в физике, особенно при изучении малых колебаний систем вокруг устойчивого состояния равновесия. Если колебание происходит в одном направлении, его называют линейным гармоническим осциллятором.

В квантовой механике линейный гармонический осциллятор называется квантовым осциллятором. Примером квантового осциллятора может служить атом, молекула и вообще любая микрочастица, колеблющаяся в узле кристаллической решетки.

Рассмотрим одномерный гармонический осциллятор, совершающий колебания вдоль оси под действием квазиупругой силы Линейным гармоническим осциллятором, называется система, потенциальная энергия которой квадратично зависит от координаты:

$$U(x) = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \qquad (1)$$

Здесь $m-$ масса частицы, а ω_0 – собственная частота осциллятора. На рис.1 зависимость (1) изображена графически. Кривая $U(x)$ своей крутизной и бесконечно большой высотой напоминает потенциальную яму [2].

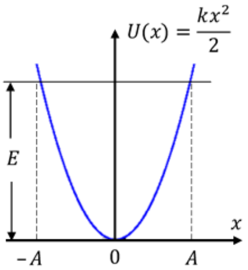

Рис.1. График зависимости потенциальной энергии от координаты

Линейный осциллятор, проявляет некоторые свойства частицы в бесконечно высокой потенциальной яме. Например, он имеет бесконечное число дискретных уровней. Но в отличие от отвесных стенок ямы, потенциал осциллятора растёт плавно, и, как следствие, появляется некоторая вероятность обнаружить частицу достаточно далеко от начала координат. Плавная форма потенциала позволяет осциллятору при определённых условиях проявить свойства классической (не квантовой) частицы. Для этого достаточно, чтобы длина волны де Бройля была меньше характерных размеров области изменения потенциала. В случае потенциальной ямы, либо потенциального барьера, такая возможность полностью исключена, так как там потенциал меняется скачком в одной точке. Перейдём к количественному решению задачи.

Напишем одномерное уравнение Шредингера с потенциальной энергией (1):

$$\psi''(x) + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega_0^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi(x) = 0 \qquad (2)$$

У него нет естественных граничных условий. Дискретные уровни энергии получаются как следствие ограниченности волновой функции [3].

Преобразуем уравнение (2), вместо координаты x введём безразмерный аргумент

$$y = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}}x$$

и вместо E - безразмерную энергию осциллятора

$$\eta = \frac{2E}{\hbar\omega_0}$$

С принятыми обозначениями уравнение Шредингера принимает вид:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\eta - \xi^2\right)\psi = 0$$

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 η:

$$\eta = 2n + 1, \qquad n = 0,1,2,...$$

Из теории дифференциальных уравнений известно, что дифференциальное уравнение вида (3), будет иметь решение в собственных значениях энергию

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0, \qquad n = 0,1,2,... \qquad (4)$$

Это соотношение определяет закон квантования энергии гармонического осциллятора. Отметим, что энергетические уровни гармонического осциллятора расположены на одинаковом энергетическом расстоянии $\Delta E = \hbar\omega_0$ друг от друга [4].

Другая важная особенность энергетического спектра, определяемая выражением (4), соответствует значению квантового числа

$$E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 \qquad (5)$$

основанное на замене производных разностными схемами. Именно такой подход был использован для вычисления полиномов Чебышева-Эрмита.

Результаты расчетов представляются в виде графиков–собственной волновой функции $\psi(x)$ (рис. 3) и распределения плотности вероятности $|\psi(x)|^2$ (рис. 4). Возможны два пути задания начальных условий - через энергию E, либо циклическую частоту ω колебаний осциллятора.

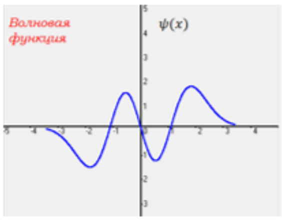

Рис 3. График волновой функции

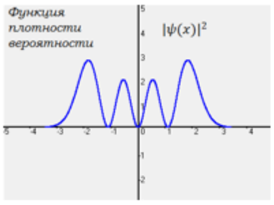

Рис 4. Плотность вероятности

Волновая функция ясно показывает общую особенность волновых функций гармонических осцилляторов, заключающуюся в том, что колебания волновой функции имеют наименьшую амплитуду и длину петли вблизи $x=0$, где кинетическая энергия максимальна, и наибольшую амплитуду и длину петли вблизи классических точек поворота, где кинетическая энергия близка к нулю [7].

Пользователю доступны следующие функции:

1) отображение координат точек графиков (наведение курсора на линию графика);
2) изменение масштаба размерной сетки графиков;
3) возможность сравнения амплитуд квантового и классического осциллятора;
4) просмотр результатов расчетов с выбранным шагом;
5) краткая теоретическая справка (кнопка “Теория” в нижнем левом углу);

Программа также производит построение графика распределения плотности вероятности для классического осциллятора.

Достоинствами данных программ являются:

–высокая наглядность представляемого материала, его доступность и интерактивность;

–большая дифференциация и индивидуализация процесса образования;

–возможность исследовать многопараметрические задачи, используемые квантовой механике и в атомной физике.

Данную программу можно использовать при преподавании темы «Линейный гармонический осциллятор в квантовой механике», а также на практических занятиях, связанных с этой темой, и на самостоятельных занятиях студентов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучения явлений и процессов в квантовой механике можно провести с использованием компьютерных программ. Это намного облегчает поиск решения и даёт возможность анализировать полученные результаты.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Соколов А.А., Лоскутов Ю.М., Тернов И.М. Квантовая механика. –М.: Просвещение, 1985. –С.327.
2. Савельев И.В. Основы теоретической физики. т.2. Квантовая механика. –М.: Наука, 2018. С. –432.
3. Давыдов А.С. Квантовая механика: учеб. пособие для вузов. –СПб.: БХВ –Петербург, 2011. С.–703.
4. Демидович, Б.П. Математические основы квантовой механики. – СПб.: Лань, 2005. –С.200.
5. A. Capri. Problems and Solutions in Non-relativistic Quantum Mechanics, World Scientific, 2001. –P.520.
6. K. Tamvakis. Problems and solutions in quantum mechanics. New York, Cambridge University Press, 2005. –P. 334.
7. Мухтаров Э.К. Электронный информационно-образовательный ресурс «Линейный гармонический осциллятор в квантовой механике». Программный продукт для ЭВМ, №DGU 12888, 03.11.2021 г.
8. Райтингер М., Муч Г. Visual Basic: для пользователя: пер с нем. –К.: Издательская группа ВНУ, 1999. –С.218.
9. Волчёнков Н.Г. Программирование на Visual Basic: В 3-х ч. Часть 3. – М.: ИНФРА–М, 2002. –С.247.
10. Сайлер, Брайан, Споттс, Джефф. Использование Visual Basic. Специальное издание.: Пер. с англ. – М.: СПб.; К.: Издательский дом «Вильямс», 2002. –С.274.