План лекции

1. Квантовый гармонический осциллятор
2. Квантово-механическая задача о квантовом осцилляторе
3. Уровни энергии осциллятора. Примеры решения задач о квантовом осцилляторе.

Нуркенов Серик Амангельдинович

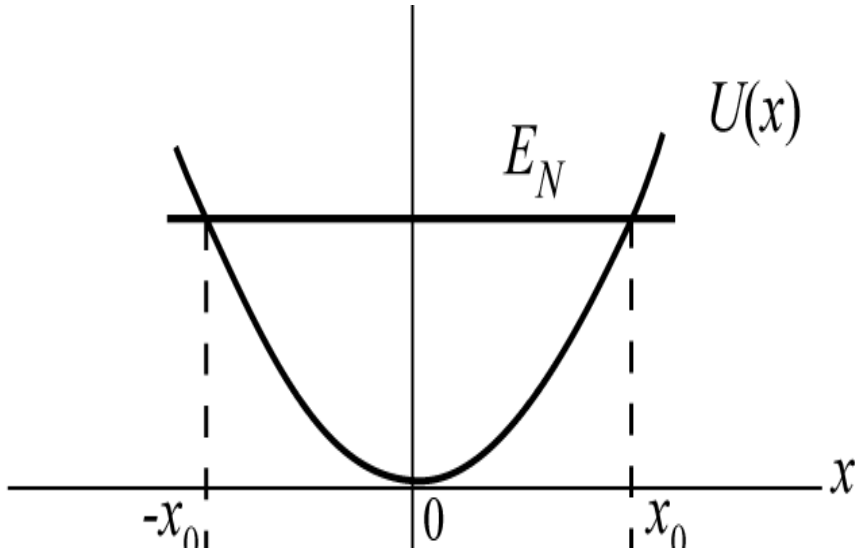
Гармоническим осциллятором называют частицу, совершающую одномерное движение под действием квазиупругой силы F=-kx.

Потенциальная энергия частицы

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

Движение частицы при наличии квазиупругих сил рассматривается в квантовой механике как нахождение частицы в параболической яме

График потенциальной энергии частицы:



В точках с координатами ***$-x_0$ и $+x_0$***, полная энергия равна потенциальной энергии. Поэтому ***с классической точки зрения частица не может выйти за пределы области $-x_0$ и $+x_0$***

Особенность волновой функции, **описывающей квантовый гармонический осциллятор, заключается в том, что она за пределами ямы отлична от нуля**. Другими словами, квантовый гармонический осциллятор может оказаться за пределами интервала $\pm x_0$, т.е. за стенками квадратичной потенциальной ямы, чего классический осциллятор не может.

Квантово-механическая задача о квантовом осцилляторе

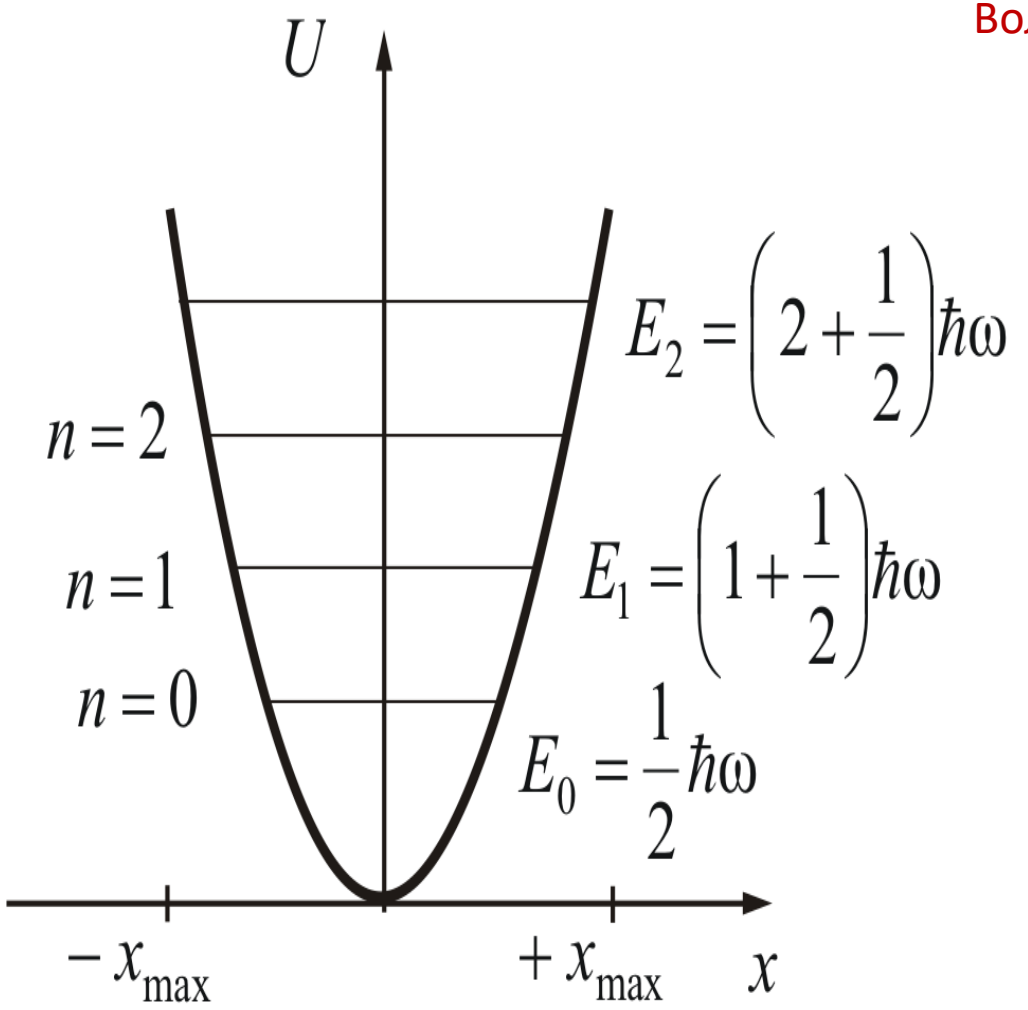
Гармонический осциллятор в квантовой механике - квантовый осциллятор - описывается уравнением Шредингера:

$$\frac{\mathrm{d}^2\Psi}{\mathrm{d}x^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m\omega^2x^2}{2}\right)\Psi=0$$

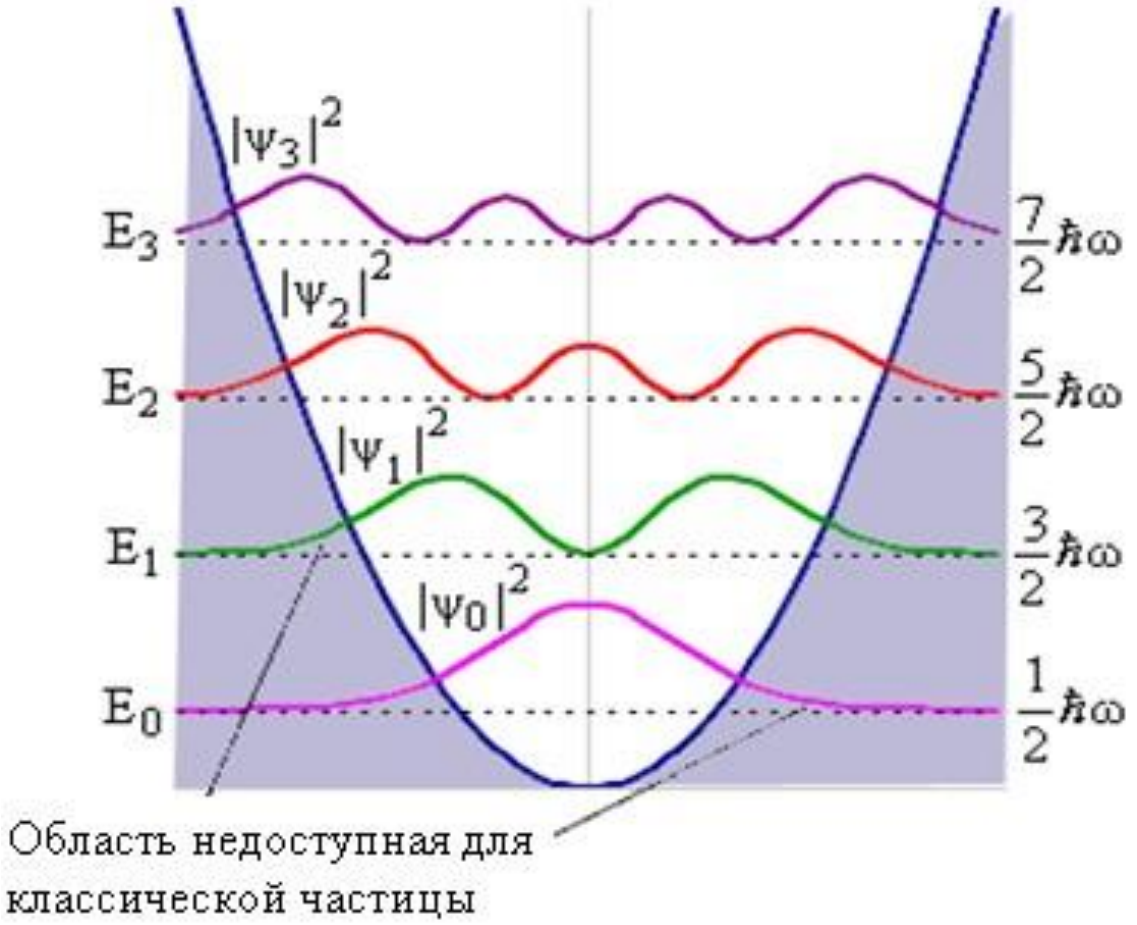
Значения ***полной энергии*** осциллятора

$$E_n=(n+1/2)\hbar\omega$$

где $n = 0, 1, 2\ldots$



Волновые функции в координатном представлении первых восьми состояний



$$E_{min} = E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$$

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

При $n = 0$, получаем значение энергии: $E_0 = \frac{\hbar\omega_0}{2}$

это так называемая **энергия нулевых колебаний, минимальная энергия квантового гармонического осциллятора.**

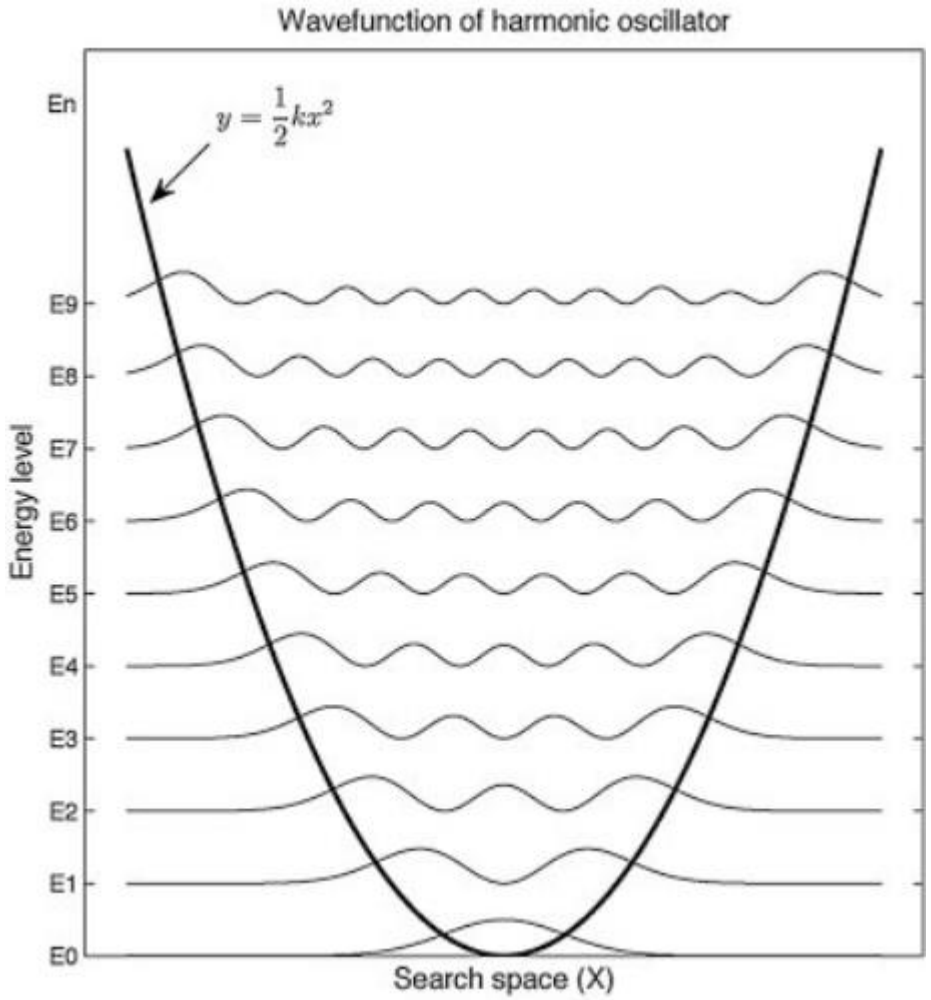
Это явление — нулевые колебания — противоречит классической картине, в которой минимальная энергия равна нулю, что подразумевает отсутствие движения.

В потенциальной яме уровни энергии могут принимать только **дискретные** значения.

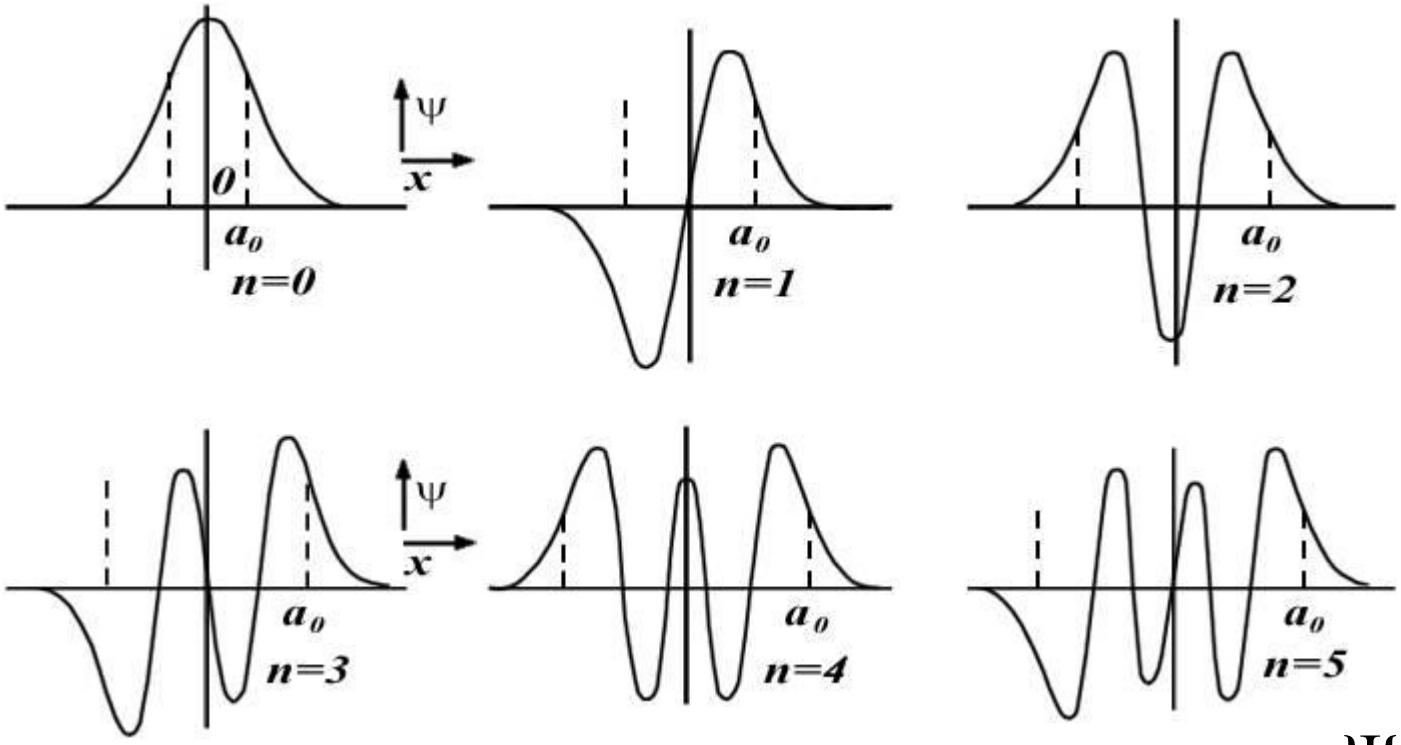
Уровни энергии осциллятора. Примеры решения задач о квантовом осцилляторе.

При n=1 : Классический гармонический осциллятор плохо предсказывает результаты квантового осциллятора и, следовательно, реальность. В классической модели частица будет проводить большую часть времени на краях (где кинетическая энергия равна нулю, а потенциальная энергия максимальна). Однако квантовая модель утверждает противоположное: частица с большей вероятностью будет находиться в центре.

При n=50: Квантовая модель начинает совпадать с классической, и частица, скорее всего, будет находиться у краёв. Такое совпадение квантовой и классической моделей на высоких квантовых уровнях называется принципом соответствия.



Волновые функции гармонического осциллятора



$$\Psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0\sqrt{\pi}}} \cdot \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

$$\Psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0\sqrt{\pi}}} \cdot \frac{2x}{x_0} \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

$$\Psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8x_0\sqrt{\pi}}} \cdot \left(\frac{4x^2}{x_0^2} - 2\right) \exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right)$$

Уровни энергии осциллятора. Примеры решения задач о квантовом осцилляторе.

Задача 1. Принимая, что волновая функция $\psi(x) = Axe^{-\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}x^2}$ удовлетворяет стационарному уравнению Шредингера для гармонического осциллятора, масса которого m и постоянная квазиупругой силы k, определите собственное значение полной энергии осциллятора.

Решение: Для решения этой задачи мы будем использовать стационарное уравнение Шрёдингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

где $U(x) = \frac{kx^2}{2}$

Дана волновая функция

$$\psi(x) = Axe^{-\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}x^2}$$

Для начала нужно найти первую производную:

$$\frac{d\psi}{dx} = \left(Axe^{-\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}x^2}\right)' = Ae^{-\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}x^2}\left(1 - \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}x^2\right)$$

Теперь находим второе производное:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \left(Ae^{-\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}x^2}\left(1 - \frac{\sqrt{mk}}{\hbar}x^2\right)\right)' = Axe^{-\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}x^2}\left(\frac{kmx^2}{\hbar^2} - \frac{3\sqrt{km}}{\hbar}\right)$$

Уровни энергии осциллятора. Примеры решения задач о квантовом осцилляторе.

Получив все производные, подставим в уравнение Шредингера и найдем полную энергию E:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}Axe^{-\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}x^2}\left(\frac{kmx^2}{\hbar^2}-\frac{3\sqrt{km}}{\hbar}\right)+\frac{kx^2}{2}Axe^{-\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}x^2}=EAxe^{-\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar}x^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{kmx^2}{\hbar^2}-\frac{3\sqrt{km}}{\hbar}\right)+\frac{kx^2}{2}=E$$

$$E=-\frac{kx^2}{2}+\frac{3\sqrt{km}}{2\hbar}+\frac{kx^2}{2}$$

$$E=\frac{3\sqrt{km}}{2\hbar}=\left|\omega^2=\frac{k}{m}\right|=\frac{3}{2}\omega\hbar$$

Ответ: $E=\frac{3}{2}\omega\hbar$