

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Н. Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

*Кафедра компьютерной физики
и метаматериалов на базе Саратовского филиала
Института радиотехники и электроники
им. В.А. Котельникова РАН*

**КВАНТОВЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР:
МАТЕРИАЛЫ К КОМПЬЮТЕРНОМУ ПРАКТИКУМУ**

**АВТОРЕФЕРАТ
ВЫПУСКНОЙ КВАЛИФИКАЦИОННОЙ
(БАКАЛАВРСКОЙ) РАБОТЫ**

студента 4 курса 431 группы
направления 03.03.02 «Физика» физического факультета
Святкина Никиты Владимировича

Научный руководитель

д.ф.-м.н., профессор

должность, уч. степень, уч. звание

подпись, дата

Лазерсон А.Г.

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой:

д. ф-м. н, профессор

должность, уч. степень, уч. звание

подпись, дата

Аникин В.М.

инициалы, фамилия

Саратов 2020 г.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Модель линейного гармонического осциллятора изучается и находит приложение в различных разделах экспериментальной и теоретической физики. Её роль особо значима в квантовой физике, объектами изучения которой являются атомно-молекулярные системы, твёрдое тело (атомная физика) и ядро (субатомная физика).

Модель линейного гармонического осциллятора позволяет описать движение тяжёлой подсистемы в молекулах и твёрдых телах, на её основе интерпретируется циклическое движение электронов в твёрдом теле, помещённом в постоянное магнитное поле и связанные с этим движением эффекты (циклическая зависимость электромагнитных характеристик от поля, в частности, намагниченности), используется при описании состояний лёгких ядер и т.д.

Выпускная квалификационная работа носит методический характер.

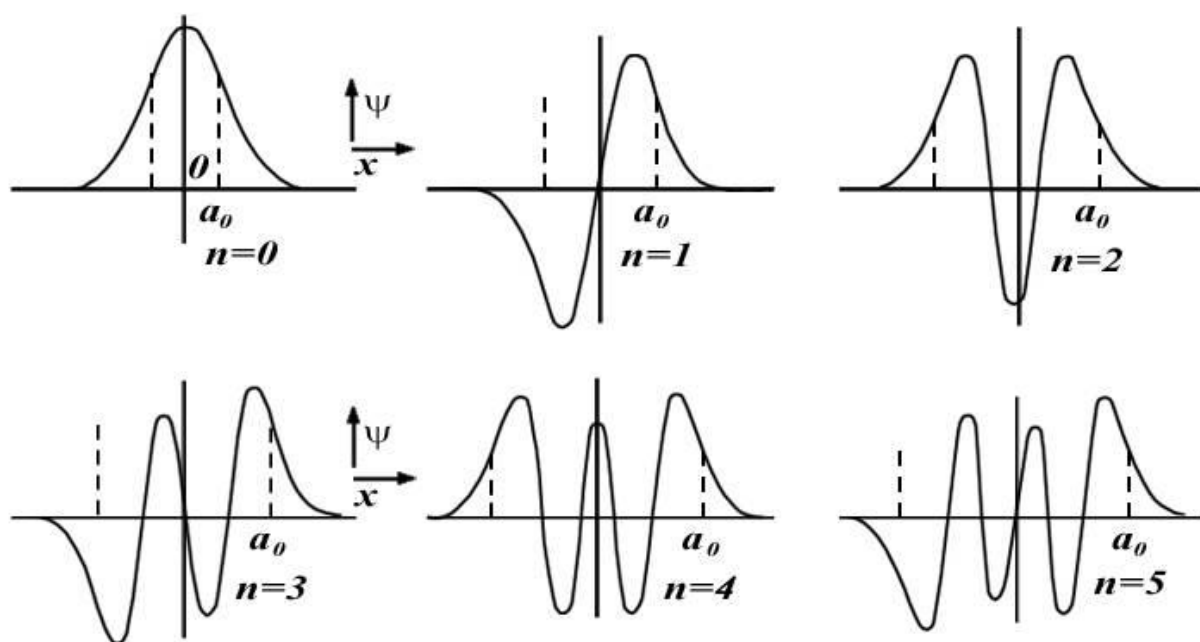
Целью выпускной квалификационной работы является последовательное рассмотрение в рамках теории квантового гармонического осциллятора вопросов численного решения уравнения Шредингера с использованием персонального компьютера (ПК), в частности, компьютерного расчета волновых функций, распределения плотностей вероятности.

Структура и объем работы. Выпускная квалификационная работа состоит из введения, основной части, состоящей из 2 глав, заключения, списка используемых источников. Всего в работе 26 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** описана практическая значимость и сформированы цели работы.

В **первой главе** представлено подробное описание задачи о квантовом гармоническом осцилляторе. Описано общее стационарное уравнение Шрёдингера и его вариации, собственные функции и полиномы Чебышева-Эрмита. Описаны характерные особенности гармонического квантового осциллятора такие как волновой спектр и волновые функции. Приведены графики волновых функций и распределения вероятности.



Волновые функции квантового осциллятора
в состояниях с $n = 0, 1, 2, 3, 4, 5$

Модель гармонического осциллятора и связанная с ним задача о движении частицы в параболической потенциальной яме является идеализацией, справедливой лишь при малых отклонениях колеблющейся частицы от положения равновесия.

Приведенный анализ движения частиц в параболической потенциальной яме позволяет сделать следующие заключения

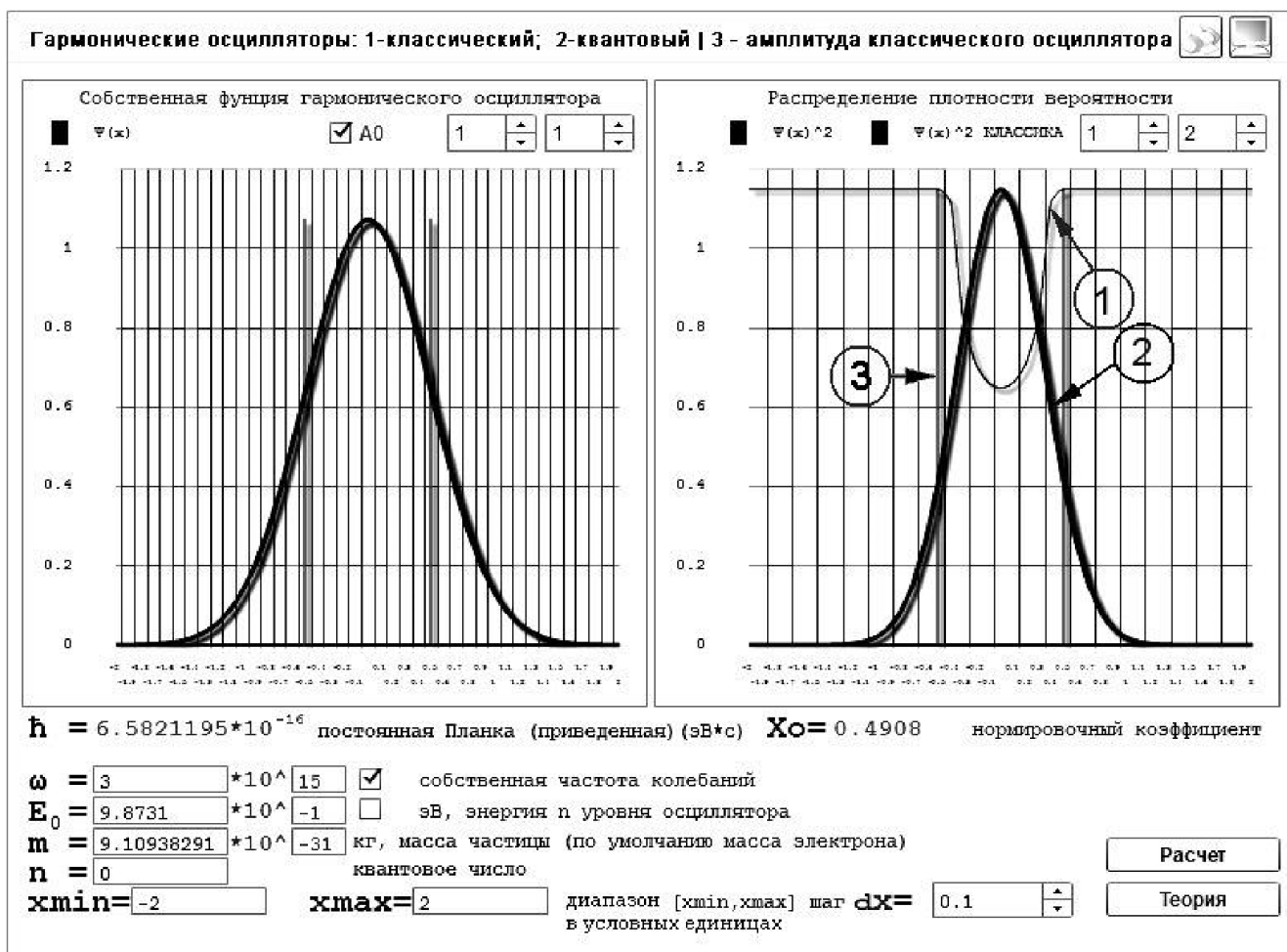
1. Энергетический спектр частицы, находящейся в яме, является дискретным, т.е. энергия частицы квантуется.

2. Частица, находящаяся в основном состоянии, т.е. на самом низшем энергетическом уровне, обладает не равной нулю энергией.

3. Плотность вероятности нахождения частицы имеет максимумы в области между классическими точками поворота и экспоненциально спадает вне классической области. Это означает, что с определенной вероятностью частица может находиться вне ямы (за исключением ям с бесконечно высокими, непроницаемыми, стенками).

4. При увеличении квантового числа на единицу волновая функция, описывающая поведение частицы в яме, приобретает дополнительную точку пересечения с осью, распределение квантовой вероятности приближается к классическому, что указывает на ослабление квантовых свойств системы.

Во второй главе представлено моделирование задачи о квантовом осцилляторе и программа для решения этой задачи. Приведены результаты работы программы при разных начальных условиях.



Графическая иллюстрация решения уравнения Шрёдингера ($n=0$)

Во второй главе также проведено сравнение свойств классического и квантового осцилляторов:

1. Энергия квантового осциллятора квантуется, т.е. принимает дискретный ряд значений [3]:

$$E_n = \hbar \omega(n+1/2), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Энергия классического осциллятора может иметь любое значение:

$$E = 1/2\mu\omega^2 A^2,$$

определяемое амплитудой A .

2. Минимальное значение энергии квантового осциллятора больше минимального значения потенциальной энергии:

$$E_{\min}^{\text{кв}} = E_0 = \hbar \omega/2 > V_{\min} = 0.$$

Эта энергия называется энергией нулевых колебаний. Для классического осциллятора минимальная энергия равна нулю, т.е. минимальной потенциальной энергии, - никаких «нулевых колебаний» нет.

3. Классический осциллятор совершает строго финитное движение между точками $-a$ и $+a$, определяемыми из условия:

$$E = V(\pm a) = 1/2\mu\omega^2 a^2.$$

Волновая функция квантового осциллятора имеет общий вид:

$$\psi(y) = e^{-\frac{y^2}{2}} u(y).$$

Существует ненулевая вероятность обнаружить частицу в классически недоступной области. Правда, эта вероятность чрезвычайно быстро (как $\exp(-y^2)$) стремится к нулю при возрастании $|x|$, а потому часто говорят, что и движение квантового осциллятора является финитным (точнее, оно есть аналог классического финитного движения).

ОСНОВНЫЕ ВЫВОДЫ

Материал ВКР, может быть включен в описание лабораторной (практической) работы, посвященной квантово-механическим моделям, изучаемых, в частности, в университетских дисциплинах "Атомная физика" и "Квантовая механика".

Кратко изложена теория квантового гармонического осциллятора, проведено сопоставление с теорией классического осциллятора, рассмотрены вопросы численного решения уравнения, в частности, компьютерного расчета волновых функций, распределения плотностей вероятности. Графическое представление результатов решения уравнения Шрёдингера позволяет наглядно продемонстрировать особенности модели квантовой физики.

Сформулированы задания и контрольные вопросы для студентов:

Задания

1. Записать общий вид волновых функций одномерного квантового осциллятора.
2. Вычислить нормировочный множитель для полиномов Эрмита-Чебышева и для волновой функции в « x » 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?

Список использованных источников

1. Савельев Н.В. Основы теоретической физики. Т.2. Квантовая механика. – М.: Наука, 1977.

2. Планк, М. О законе распределения энергии в нормальном спектре. Избранные научные труды: [пер. с нем. под ред. А.П. Виноградова] / М. Планк. – М.: Наука, 1975.

3. Наумов А. И. Квантовая механика.

URL: http://naumov.th.rplab.ru/pdf/kvmeh/lecture_8.pdf

4. Шпольский, Э.В. Атомная физика / Э.В. Шпольский. – СПб. Лань, 2010.

5. Бом Д. Квантовая теория. – М.: Физматгиз, 1961.

6. Ландау, Л. Д. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2004.

7. Демидович, Б.П. Математические основы квантовой механики / Б. П. Демидович. – СПб.: Лань, 2005.

8. Дирак П.А.М. Принципы квантовой механики. – М.: Наука, 1980.

9. Ландау Л.Д. Лифшиц Е.М. Квантовая механика. – М.: Наука, 1978.

10. Мартинсон Л.К., Смирнов Е.В. Квантовая физика, 2004.

11. Цветков, Ф.Ф. Тепломассообмен / Ф.Ф. Цветков, Б.А. Григорьев. – М.: Издательский дом МЭИ, 2006.
12. Машкин Н.Ф. Квантовая физика. – М.,2001.
13. Мигдал А.Б. Квантовая физика и Нильс Бор. – М.: Знание.
14. Мессиа А. Квантовая механика. Т.1,2.-М.: Наука,1978.
15. Басов А.А., Кайнова А.В., Кузьма М. М., Субарев М. А., Минеев И. В., Худяков И. С., Яшина А.Н. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧИ О КВАНТОВОМ ОСЦИЛЛЯТОРЕ // Труды НГТУ им. Р. Е. Алексеева. 2016. № 2(113). С. 67 – 74.