Универзитет у Београду
ФАКУЛТЕТ ЗА ФИЗИЧКУ ХЕМИЈУ
www.ffh.bg.ac.rs
Студентски трг 12-16, п. пр. 47, 11158 Београд 118, ПАК 105305 // тел +381 11 2635-545, тел/факс +381 11 2187-133, ffh@ffh.bg.ac.rs

Univerzitet u Beogradu

Fakultet za fizičku hemiju

Primena računara u fizičkoj hemiji

SVOJSTVENA STANJA LINEARNOG HARMONIJSKOG OSCILATORA

Profesor:

Dr Miloš Mojović

Student:

Marko Jovanović 2015/0015

Teorijski uvod:

Linearni harmonijski oscilator (LHO) je pojam preko kojeg se veliki broj realnih sistema sa sličnim ponašanjem može opisati (bar približno u izvesnoj meri). Proučavanje ponašanja nekog fizičkog sistema u blizini stabilnog ravnotežnog položaja može se svesti na računanje jednačina koje predstvljaju oscilacije harmonijskog oscilatora (računanje se vrši u limitu malih oscilacija). Rezultati koji se dobijaju za LHO najviše se primenjuju za oscilacije jezgara u molekulu ili oscilacije atoma ili jona u kristalnoj rešetki. LHO je jedan od retkih primera kvantnih sistema čija se Šredingerova jednačina može egzaktno rešiti.

Ukupna energija klasičnog LHO je zbir kinetičke i potencijalne energije (T i U):

$$1)\ \ E = T + U = \frac{m}{2}\left(\frac{dx}{dt}\right)^2 + \frac{kx^2}{2}$$

m – masa čestice koja vrši oscilacije

x – koordinata čestice

k – konstanta sile

Kvantnomehanički pristup određivanja energije LHO

U kvantnoj mehanici se svakoj fizičkoj veličini pripisuje odgovarajući operator. Tako se za energiju definiše operator energije koji se naziva Hamiltonov operator ili Hamiltonijan ($\hat{\mathrm{H}}$).

Ukupna energija LHO u kvantnoj mehanici se izvodi iz klasičnog izraza za energiju 1) tako što se pravilom korespondencije odgovarajućim klasičnim promenjivim pridruži kvatnomehanički operator:

$$2)\ \ \hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{X}^2}{2}$$

$\hat{P}_x$ – operator koji odgovara impulse

$\hat{X}$ – pperator koji odgovara x koordinati čestice

Kvantnomehaničko izračunavanje energije LHO svodi se na rešavanje jednačine svojstvenih vrednosi (rešavanje svojstvenog problema hamiltonijana):

$$3)\ \ \hat{\mathrm{H}}\left|\varphi\right\rangle = E\left|\varphi\right\rangle$$

Jednačina svojstvenih vrednosti u koordinatnoj reprezentaciji posle uvodjenja bezdimenzione konstante $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$ je:

$$4)\ \hat{\mathrm{H}} = \frac{\hbar\omega}{2}(\xi^2 - \frac{d^2}{d\xi^2})$$

Kako je talasna funkcija normirana, $\int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi(x)|^2\,dx = 1$, jednačina prelazi u oblik:

$$5)\ -\frac{d^2\varphi(\xi)}{d\xi^2} + \xi^2\,\varphi(\xi) = \frac{2E}{\hbar\omega}\varphi(\xi)$$

Jednačina (5) se može rešiti pomoću lestvičastih operatora (operatora spuštanja i podizanja $\hat{a}$ i $a^{\dagger}$redom.

$$6)\ \hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} + \frac{i\hat{P}_x}{m\omega}\right)$$

$$7)\ \hat{a}^{\dagger} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(\hat{x} - \frac{i\hat{P}_x}{m\omega}\right)$$

Odnosno uvodjenjem konstante ξ:

$$8)\ \hat{a} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)$$

$$9)\ \hat{a}^{\dagger} = \sqrt{\frac{1}{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)$$

Komutator $\left[\hat{a},\hat{a}^{\dagger}\right]$ može se odrediti koristeći kanonske komutacione relacije i jednak je:

$$10)\ [\hat{a},\hat{a}^{\dagger}] = \hat{a}\hat{a}^{\dagger} - \hat{a}^{\dagger}\hat{a} = 1$$

Može se definisati operator $\hat{N}$ koji je ermitski i koji komutira sa operatorom $\hat{H}$:

$$11)\ \hat{N} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}.$$

Takodje se može definisati operator hamiltonijana preko operatora $\hat{N}$:

$$12)\ \hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)$$

Svojstvene vrednosti komutirajućih operatora $\hat{N}$ i $\hat{H}$

Operatori $\hat{N}$ i $\hat{H}$ imaju zajedničke svojstvene funkcije usled medjusobnog komutiranja. Svojstvene vrednosti LHO su nedegenerisane i detaljan dokaz može se pronaći u datoj literaturi. Svojstvene vrednosti operatora $\hat{N}$ su skup celih nenegativni brojeva:

13) n = 0,1,2,3,...

Može se pokazati da je osnovno stanje LHO (n = 0) nedegenerisano, a iz toga izvesti zaključak i da su ostali nivoi odnosno stanja koji se dobijaju pomoću operatora opdizanja takodje nedegenerisani.

Ako je n = 0 nedegenerisana svojstvena vrednost (odgovara joj samo jedno svojstveno stanje), onda je n+1 takodje nedegenerisana. Iteracijom će sve naredne vrednosti 2,3,4,... biti nedegenerisane.

Osnovno stanje, za n = 0 je:

$$14)\ \varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega^2}{2\hbar}}$$

Svi svojstveni potprostori svakog od svojstvenih stanja LHO su jednodimenzioni pa se može pisati:

$$15)\ \hat{N}\left|n\right\rangle = n\left|n\right\rangle$$

$$16)\ \hat{H}\left|n\right\rangle = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\left|n\right\rangle$$

$$17)\ E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Jednačina 16) je svojstvena vrednost energije LHO koja zavisi od kvantnog broja n.

$\left|n\right\rangle$ – označava svojstveno stanje zajedničko za operatore $\hat{N}$ i $\hat{H}$.

Delovanje operatora spuštanja i podizanja na stanje $\left|n\right\rangle$

$$18)\ \hat{a}\left|n\right\rangle = \sqrt{n}\left|n-1\right\rangle$$

$$19)\ \hat{a}^{\dagger}\left|n\right\rangle = \sqrt{n+1}\left|n+1\right\rangle$$

Svojstvena stanja operatora hamiltonijana

Ako se upotrebi jednačina 14) za talasnu funkciju i operator podizanja iz jednačine 9) u koordinatnoj reprezentaciji dobija se sledeći izraz za svojstvenu funkciju LHO:

$$20)\ \varphi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\pi^{-\frac{1}{4}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\frac{\xi^2}{2}}$$

Izraz 20) može se napisati u obliku:

$$21)\ \varphi_n(\xi) = (-1)^n \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\pi^{-\frac{1}{4}} e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

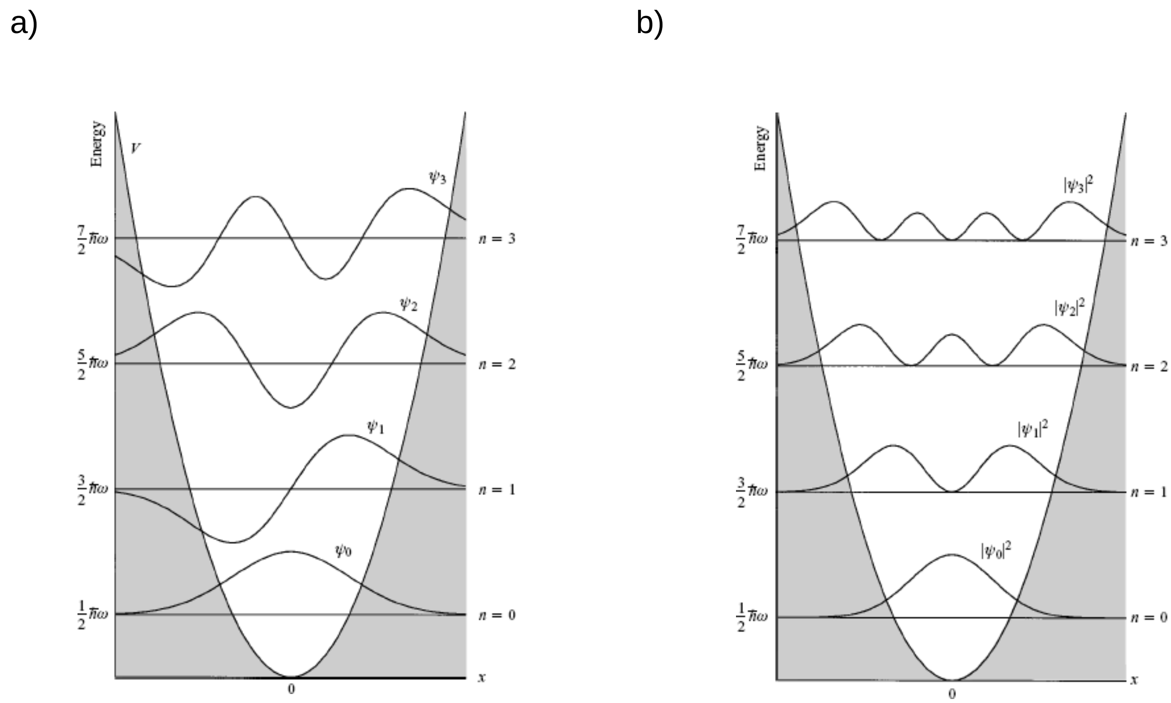
Definicija Ermitovog polinoma:

$$22)\ H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$

Izraz 21) preko Ermitovog polinoma ima sledeći oblik:

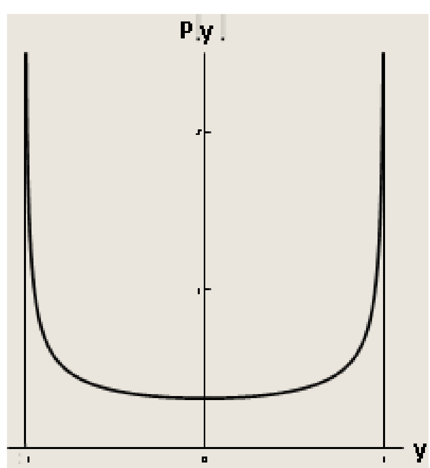
$$23)\ \varphi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2^n\, n!}}\pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi)$$

Izraz 23) predstavlja svojstveno stanje hamiltonijana odnosno stanje LHO koje zavisi od kvantnog broja n.



Slika 1. a) prikaz energetskih nivoa i oblik svojstvenih funkcija LHO za dati energetski nivo (n=0 do n=4), b) prikaz energetskih nivoa I kvadrata svojstvenih funkcija LHO takodje za iste vrednosti n kao pod a).

Kvadrati svojstvenih funkcija $\left|\varphi_n(\xi)\right|^2$ predstavljaju gustinu verovatnoće nalaženja čestice u datom stanju definisanom kvantnim brojem n. Kako kvantni broj n raste, može se videti da gustina verovatnoće raste oko amplitudnih položaja a smanjuje se oko ravnotežnog što odgovara klasičnom slučaju, slika 2.



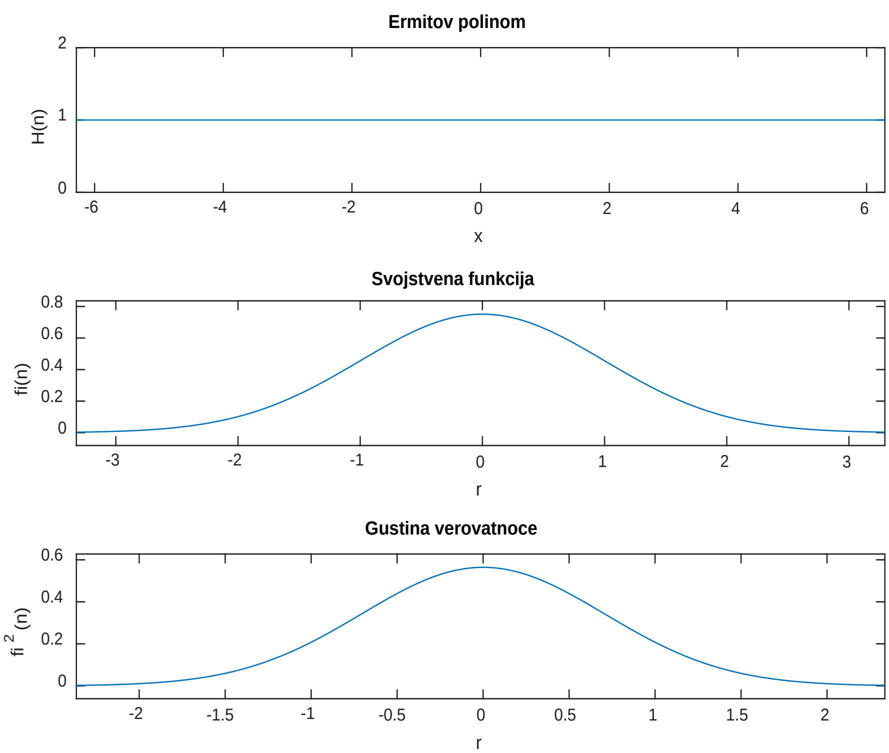
Slika 2. Gustina verovatnoće za klasični LHO

Podaci dobijeni iz programa:

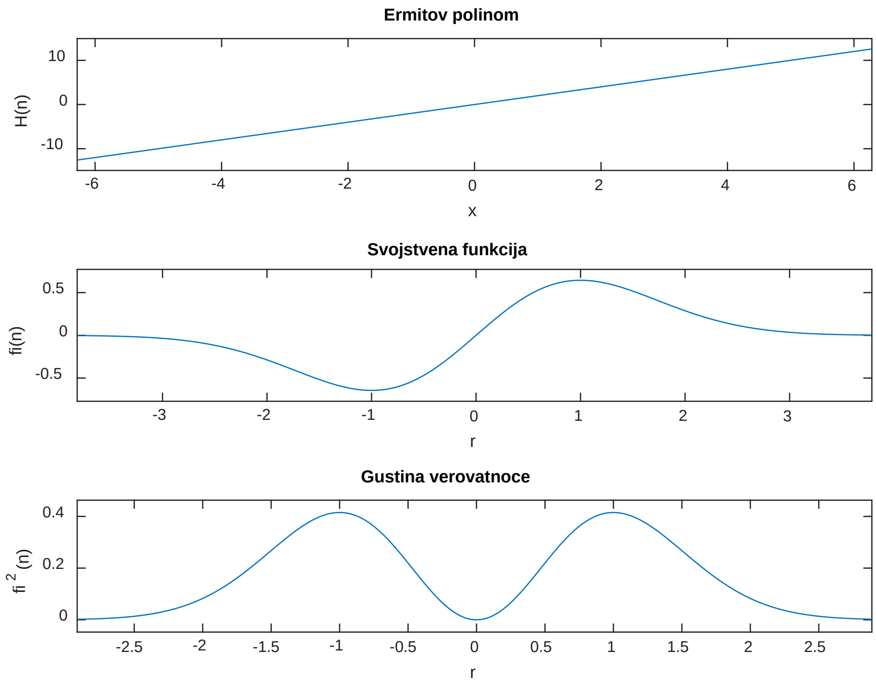
Nakon pokretanja programa potrebo je uneti odgovarajuću vrednost za kvantni broj n nakon čega program izbacuje tri grafika. Grafik 1. na kome je prikazan Ermitov polinom za zadato n, grafik 2. na kome je prikazana svojstvena funkcija za zadato n i grafik 3. na kome je prikazana gustina verovatnoce nalaženja čestice za zadato n. Program je napravljen tako da se mogu uneti i vrednosti n koje su negativne i koje nisu celi brojevi i tako da prikazuje grafike za te vrednosti da bi korisnik mogao da vidi koja stanja za LHO ne postoje. Takodje program izbacuje i vreme koje je potrebno za prikaz grafika.

Primeri:

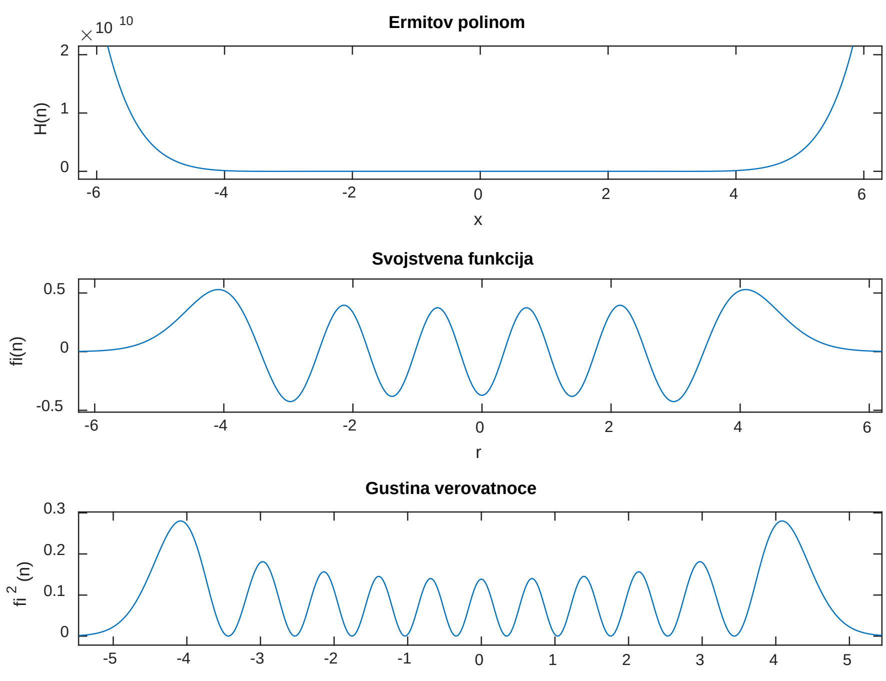
n = 0



n = 1


Ermitov polinom
H(n)
10
0
-10
-6
-4
-2
0
2
4
6
x
Svojstvena funkcija
fi(n)
0.5
0
-0.5
-3
-2
-1
0
1
2
3
r
Gustina verovatnoce
fi 2 (n)
0.4
0.2
0
-2.5
-2
-1.5
-1
-0.5
0
0.5
1
1.5
2
2.5
r

n = 10


Ermitov polinom
× 10 10
H(n)
2
1
0
-6
-4
-2
0
2
4
6
x
Svojstvena funkcija
fi(n)
0.5
0
-0.5
-6
-4
-2
0
2
4
6
r
Gustina verovatnoce
fi 2 (n)
0.3
0.2
0.1
0
-5
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4
5
r