ŠIAULIŲ UNIVERSITETO
GAMTOS MOKSLŲ FAKULTETO
FIZIKOS KATEDRA

MANTVYDAS VAIČIUS

KVANTINIS OSCILIATORIUS IR JO KOMPIUTERINIS MODELIAVIMAS

Fizikos studijų programos
Bakalauro darbas

Darbo vadovas:
dr. Rasa Žemaičiūnienė

Šiauliai, 2010

Anotacija

Bakalauro darbą „Kvantinis osciliatorius ir jo kompiuterinis modeliavimas“ sudaro įvadas, 4 skyriai, išvados ir literatūros šaltiniai. Darbe pateikti 26 paveikslai ir 7 lentelės. Darbo apimtis 56 puslapiai.

Darbe pasinaudojant kompiuterine matematine sistema „*Mathcad 14 Professional*“, siekiama išanalizuoti kvantinį osciliatorių ir pateikti jo būsenų vizualizacijas. Pirmajame skyriuje nagrinėjamas informacinių technologijų panaudojimas fizikoje, bei reiškinių modeliavimo galimybės. Antrajame skyriuje aprašytas harmoninis osciliatorius. Trečiajame skyriuje nagrinėjamas vienmatis kvantinis osciliatorius, jo hamiltoniano savybės, banginės funkcijos, bei energijos spektras. Ketvirtajame skyriuje pagal sukurtą kompiuterinį modelį nagrinėjamas trimatis izotropinis kvantinis osciliatorius ir pateikiamos jo būsenų vizualizacijos.

Medžiaga tiktų mokomajam darbui aukštojoje mokykloje, studijuojant kvantinės mechanikos reiškinius.

Annotation

The bachelor thesis „Quantum oscillator and its computer modeling“ consists of an introduction, 4 section, conclusions and literature sources. 26 pictures and 7 tables are included in the thesis. The scope of the thesis is 56 pages.

In the thesis, it is strived to analyse quantum oscilator and present its states visualations using mathematical system *Mathcad 14 Professional*“. In the first section, the usage of information technologies in the physics is considered. In the second section we analize harmonic quantum oscilator. In the third section, there is stated the theory concerning the one dimentional harmonic quantum oscilator. In the fourth section, according the developed computer model, there is analyzed the three dimensional isotropic quantum oscillator and the visualizations of its probability densities are presented.

The material would suit to educational work at higher education school, studying quantum mechanics.

T U R I N Y S

ĮVADAS 4

1. INFORMACINIŲ TECHNOLOGIJŲ PANAUDOJIMAS FIZIKOJE 6

2. HARMONINIO OSCILIATORIAUS MODELIS FIZIKOJE 10

2.1 Tiesinis harmoninis osciliatorius 11

2.2 Osciliatoriaus modelis – kvantinėje fizikoje 14

2.3 Osciliatoriaus modelis – molekulinėse sistemose 15

3. VIENMATIS KVANTINIS OSCILIATORIUS 18

3.1 Hamiltonianas ir jo savybės 18

3.2 Kvantinio osciliatoriaus būsenų energijos spektras 19

3.3 Kvantinio osciliatoriaus būsenų banginės funkcijos 23

4. KVANTINIO OSCILIATORIAUS KOMPIUTERINIS MODELIAVIMAS 29

4.1 Trimačio kvantinio osciliatoriaus banginė funkcija ir kvantiniai skaičiai 30

4.1.1 Trimatė Šredingerio lygtis 30

4.1.2 Radialioji funkcija 33

4.1.3 Sferinė harmonika (kampinė funkcija) 40

4.2 Trimačio kvantinio osciliatoriaus būsenų vizualizacija 47

IŠVADOS 54

LITERATŪRA 55

ĮVADAS

Mikropasaulyje galiojantys dėsningumai skiriasi nuo klasikinio pasaulio dėsningumų. Daugelį mikropasaulio reiškinių pademonstruoti neįmanoma, o paaiškinimas ir analizinis aprašymas yra sudėtingas, todėl galime pasinaudoti reiškinio kompiuteriniu modeliu.

Kvantinis osciliatorius – mechaninės švytuoklės kvantinis analogas, jo analizė ir kompiuteriniai modeliai plačiai taikomi šiuolaikinėje dalelių fizikoje, branduolinėje energetikoje ir net kvantinėje elektronikoje.

Šiuolaikinėje fizikoje vis plačiau taikomas įvairių reiškinių ir procesų modeliavimas, kuris šiandien tampa vienu iš pagrindinių mokymo metodų ir yra neatsiejamas tyrimuose, nes dažniausiai atliekant daugelį šiuolaikinių eksperimentų, pirmiausiai sukuriamas eksperimento kompiuterinis modelis, daromos prognozes ir keliamos hipotezės.

Modeliavimas yra vienas iš pagrindinių būdų suprasti mus supančią tikrovę ir pažinti jos reiškinius. Dažniausiai fizikiniuose modeliuose integruojami trys dalykai: fizika, matematinė analizė ir programaviams. Modeliavimas taip pat dažnai vadinamas matematine architektūra, nes modelis, kaip konstrukcija, turi būti grįstas argumentais, stebėjimais ir dėsningumais, turi atlikti tam tikrą funkciją – apibūdinti, vizualizuoti, suprantamai perteikti reiškinį ar procesą, bei svarbiausia, modelis turi būti realybės artutinumas, t.y. kuo tiksliau atspindėti nagrinėjamą reiškinį. Tam tikrais atvejais modelį galima panaudoti ir išvadoms gauti. Kompiuterinis modeliavimas ypač plačiai taikomas fizikos srityse, kuriuose atlikti eksperimento neįmanoma, pvz. juodųjų bedugnių tyrimuose, arba eksperimento atlikimui nėra lėšų, ar net kai eksperimentą reikia atlikti keletą kartų su vis kitokiomis pradinėmis sąlygomis.

Darbo tikslas: Išanalizuoti trimatį kvantinį osciliatorių ir modeliuojant kompiuterine matematine sistema „*MathCad 14 Professional“* pateikti jo būsenų vizualizaciją.

Uždaviniai:

1. Surinkti ir susisteminti medžiagą apie kvantinį osciliatorių.
2. Išanalizuoti modeliuojamą reiškinį siekiant gauti galutinius analizinius sprendinius, tinkamus kompiuteriniam modeliavimui.
3. Kompiuterine matematine sistema „*Mathcad 14 Professional*“ atlikti kvantinio osciliatoriaus būsenų vizualizaciją.

Tyrimo metodai:

1. Mokslinės ir dalykinės literatūros analizė.
2. Analizinis sprendimas.
3. Modeliavimas kompiuterine matematine sistema „*Mathcad 14 Professional*“.

Darbo struktūra:

Darbas sudarytas iš:

- Įvado, kuriame atskleidžiami darbo tikslai ir uždaviniai.
- Teorinės dalies, kurioje pateikiamos trimatį kvantinį osciliatorių aprašančios lygtys ir jų analiziniai sprendiniai.
- Praktinės dalies, kurioje pateikiama trimačio kvantinio osciliatoriaus būsenų vizualizacija ir jų analizė.
- Išvadų.
- Literatūros sąrašo.

1. Informacinių technologijų panaudojimas fizikoje

Informacinės technologijos neįtikėtinai sparčiai tobulėja, nuolat atsinaujina. Visuotina informacinių technologijų plėtra sąlygoja daugybę naujų taikymų, be kurių neįmanoma šiuolaikinė nuolat besimokanti, žiniomis grindžiama visuomenė. Informacinės technologijos vis labiau įsilieja į mokymo ir mokymosi procesą, tampa neatsiejama jo dalimi, daro didelę įtaką informacinės visuomenės formavimuisi. Šiuolaikines informacines priemones ir technologijas skatinama vartoti visuose mokomojo proceso lygmenyse, mokant ir besimokant įvairių dalykų.

Didėjanti modeliavimo žinių ir įgūdžių paklausa besiformuojančioje informacinėje visuomenėje, pažinimo ir modeliavimo procesų bendrumas ir kai kurie kiti faktoriai lemia tai, kad šiandien modeliavimas tampa vienu pagrindinių mokymo metodų, ypač aukštosiose mokyklose. Tiek moksleiviai, tiek studentai mielai naudojasi kompiuteriu, ir todėl, kad šiuo būdu gauta informacija priimama ir vertinama gana dėmesingai, informacinių technologijų srities pasiekimus galima gana efektyviai panaudoti mokymo procese (Kvietkauskienė, 2002).

Šiuolaikinis mokslas jau nebegali išsiversti be informacinių technologijų. Tiriamos vis sudėtingesnės sistemos, analizuojama vis daugiau duomenų ir norint kuo tiksliau išspręsti šiuolaikines problemas reikia pasitelkti vis daugiau skaičiavimo galios. Gali pasirodyti kad daugelį iš pirmo žvilgsnio paprastų uždavinių įmanoma išspręsti analiziškai, tačiau skaitmeninių technologijų mums gali prireikti jau sprendžiant ir net trijų kūnų uždavinį. Taigi nuo paprastų sistemų iki sudėtingų, kurių išanalizavimui reikia atsižvelgti į daugelį veiksnių, mus skiria tik vienas žingsnis.

Esminės žinios įgyjamos, plečiamos nuodugniau analizuojant fizikinius reiškinius, mokslines idėjas, atliekant stebėjimus ir bandymus. Tai gali vaizdžiau ir išsamiau pateikti informacinių technologijų panaudojimas fizikoje.

Kompiuterinis modeliavimas, kaip ir laboratoriniai eksperimentai yra tik metodas, kuris naudojamas sudėtingiems reiškiniams nagrinėti. Todėl jį sėkmingai galima taikyti modeliuojant įvairius fizikinius procesus galima imituoti įvairių reiškinių vyksmą, savybes, mechanizmą, keisti modelio parametrus, aiškintis dėsningumus ir taip juos geriau suprasti. Tobulėjant kompiuteriams ir skaičiavimo metodams, funkcijų vertes, kurių anksčiau tekdavo ieškoti lentelėse, dabar galime dideliu tikslumu apskaičiuoti kompiuteriu. Tai labai patogu. Naudojantis kompiuterinėmis programomis galime greitai apskaičiuoti ir vizualizuoti

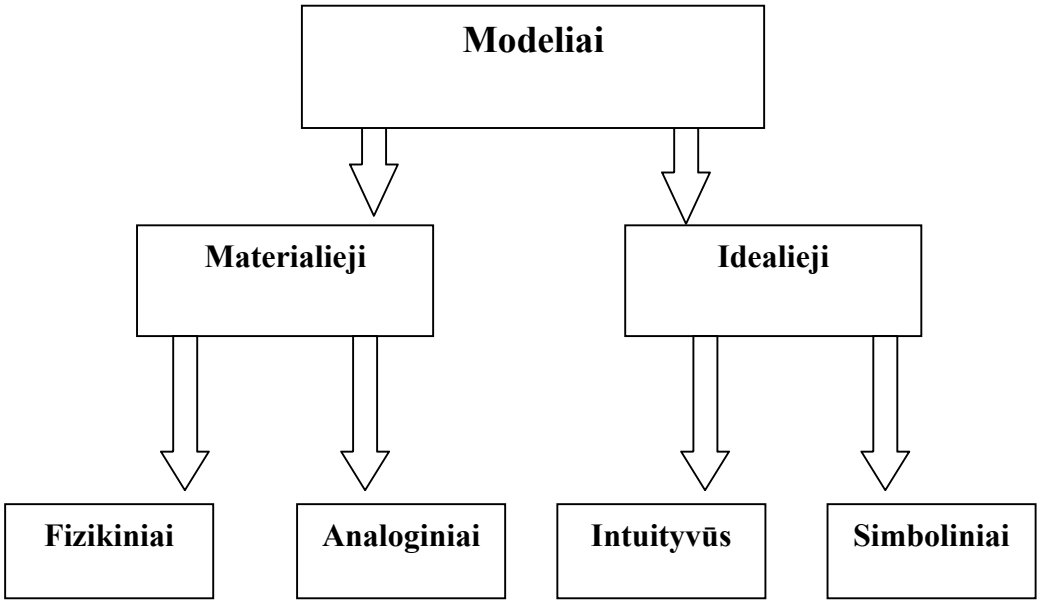
sudėtingą funkciją, o jos savybes panagrinėti tiesiog kompiuterio ekrane (Kvietkauskienė, 2002).

Daugelį kvantinės mechanikos reiškinių žmogui sudėtinga įsivaizduoti, nes šie reiškiniai sunkiai suvokiami. Tokie reiškiniai yra kaip tunelinis efektas, bangos ir dalelės dvilypumas ar dalelės savybė būti neapibrėžtoje erdvės dalyje. Šių ir kitų kvantinės mechanikos reiškinių suvokimą ir įsisavinimą palengvina kompiuterinis modeliavimas, t.y. konkretaus reiškinio modelis. Keisdami pradines ir kraštines sąlygas galime stebėti kaip keičiasi procesas, kaip nuo konkrečių parametrų priklauso sistemos ar reiškinių rezultatai.

Kas yra „*modelis*“? Juk šis žodis turi tiek įvairiausių reikšmių, vienam modelis gali būti paprasčiausias gaublys, kitam sudėtinga kompiuterinė programa atspindinti realų fizikinį reiškinį. Bendru atveju galime pasakyti, kad *modelis – tai tam tikro objekto, proceso arba reiškinio analogas, atspindintis orginalo savybes ir charakteristikas ir net tam tikromis sąlygomis galintis pakeisti orginalą*. Be to modeliui galioja tie patys fizikiniai dėsniai, todėl juo patogu naudotis atliekant eksperimentus, lengva keisti mus dominančius parametrus ir t.t. Bet kuriuo atveju modelis turi būti kuo tikslesnė orginalo kopija, t.y. jis turi būti realybės artutinumas, nes kuriant pernelyg paprastą proceso ar reiškinio modelį, jis gali prarasti mums dominančias orginalo savybes, tačiau tai daro modelį labai sudėtingą. Verta pažymėti, kad kuriant daugelį modelių mokslininkai stengiasi išlaikyti balansą, tarp modelio paprastumo ir tikslumo, t.y. siekiama kad modelis būtų kuo paprastesnis, bet išlaikytų orginalo pagrindines savybes.

Modeliavimas, kaip vienas iš pažinimo ir tyrimo įrankių, turi nemažai privalumų. Jis yra vienintelis tyrimo būdas, jei objektas yra nepasiekiamas (pvz., juodosios bedugnės, pulsarai) arba retai stebimas gamtoje (pvz., kamuolinis žaibas). Modelis suteikia galimybę stebėti procesą su vis kitokiomis pradinėmis sąlygomis, be to pasitelkdami modelį galime atlikti manipuliacijas laiku, t.y. „ištemti“ laiko mąstelį (pvz., kai tiriami destrukciniai objektų susidūrimai) arba „suspausti“ (pvz., kai modeliuojamos virtualios evoliucionuojančios sistemos).

Modeliai gali būti materialieji ir mintiniai (idealieji). Materialieji modeliai yra dviejų rūšių – fizikiniai (kai prototipas ir jo modelis turi tą pačią fizikinę prasmę) ir analoginiai (kai prototipas ir modelis turi skirtingą fizikinę prasmę, bet aprašomi tomis pačiomis matematinėmis lygtimis). Idealieji modeliai skirstomi į intuityviuosius (kai objekto aprašymas negali būti visiškai formalizuotas) ir simbolinius (vaizduojančius modelį ženklais bei simboliais).



1 pav. Modelių klasifikacija

Fizikiniai ir techniniai procesai vyksta pagal tam tikrus dėsnius. Dažniausiai šių dėsnių turinys ir forma yra žinomi, tačiau perėjimas nuo fundamentalių dėsningumų, prie konkrečios proceso matematinės išraiškos yra gan sudėtingas, ypač jei tiriamąjį procesą ar sistemą veikia dėsniai priklausantys skirtingiems mokslams. Pavyzdžiui tiriant hidraulines sistemas reikia atsižvelgti į mechanikos, termodinamikos ir chemijos dėsnius. Tokiais atvejais gaunama analitinė sistemos išraiška turinti sudėtingą diferencialinių lygčių sistemos formą. Fundamentinių mokslų dėsniuose figūruoja esminės sąvokos (jėga, energija, šilumos kiekis ir t.t.), kurių dydžiai yra fizikinių reiškinių kiekybiniai matai. Tuo tarpu inžinerijoje ir eksperimentinėje fizikoje naudojami betarpiškai matuojami dydžiai – matmenys, laikas, temperatūra, bei fizikinės konstantos. Išreikšti sistemą matuojamų dydžių funkcine priklausomybe, konkretizuoti fundamentalius dydžius, pritaikant juos sukurtam modeliui, reiškia sudaryti pagrindines sistemą aprašančias lygtis. Šios lygtys kiekybiškai išreiškia bendrąjį supratimą apie sistemos mechanizmą. Modelis savyje turi susieti tiek atskiro proceso savybes, tiek fundamentalius mokslo principus. Todėl fizikinis modelis turi būti sugretinamas ne su pavieniu reiškiniu, o su visa reiškinių klase. Atitinkamai lygčių sistemos daugiareikšmiškumas atspindi šio sprendinio tinkamumą tam tikrai uždavinių aibei. Konkretų aibės uždavinį galima išskirti parenkant pradines, kraštines ir papildomas sąlygas. Kiekvienam procesui ar sistemai galima nustatyti parametrus, kurių ryšiai lemia proceso eigą ar sistemos evoliuciją. Svarbu nuo kokio pradinio būvio prasidėjo procesas (pradinės sąlygos) ir kokiomis sąlygomis sistemos sąsajoje su aplinka vyksta procesas (kraštinės

sąlygos). Pradinės ir kraštinės sąlygos, bei kintamųjų (parametrų) apibrėžtumo ribos išskiria procesą iš panašių procesų visumos.

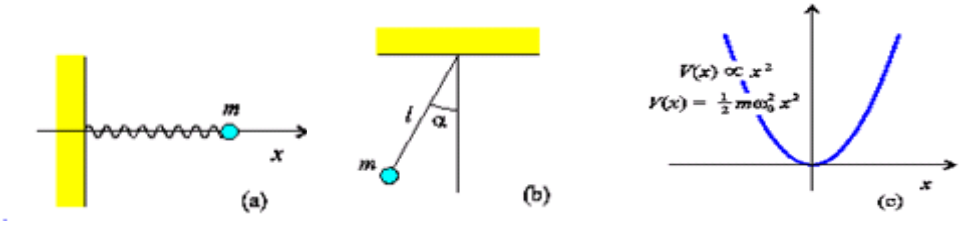
Naudojant įvairias modeliavimo programas galima patiems atrasti dėsningumus, modeliuoti situacijas, spręsti problemas. Tačiau reikia nepamiršti, kad informacinės technologijos yra tik pagalbinės priemonės, padedančios įsisavinti medžiagą, todėl jas būtna taikyti skatinant mąstymą.

Kompiuterinis modeliavimas svarbus ir tuo, kad jis suintensyvina mokymosi procesą, šis procesas tampa patrauklesnis, dinamiškesnis. Kopiuterinių modelių ir modeliavimo sistemų interaktyvumas itin reikšmingas: skatinama iniciatyva, ugdomas kūrybiškumas.

Modeliavimas fizikoje yra labai svarbus, nes dauguma naudojamų analizinių priemonių, kaip diferencialinis skaičiavimas, dažniausiai tinka tiesiniams uždaviniams spręsti. Tačiau dauguma realiai vykstančių procesų yra netiesiniai, todėl maži vieno kintamojo pokyčiai gali priversti prie didelių kito kintamojo pokyčių. Netiesinius uždavinius galima išspręsti tik atskirais atvejais, tačiau kompiuteris suteikia galimybę tyrinėti netiesinius reiškinius. Be to kompiuterinis modeliavimas suteikia galimybę naudotis dideliu kintamųjų skaičiumi. Kompiuterinį modeliavimą kartais dar vadiname skaičiuojamuoju eksperimentu, arba „mintiniu“ eksperimentu, kadangi jis turi labai daug bendro su laboratoriniu eksperimentu. Tačiau tiek laboratoriniai eksperimentai, tiek modeliai nepakeičia samprotavimų, o yra instrumentas, kuris panaudojamas sudėtingų reiškinių analizei.

2. Harmoninio osciliatoriaus modelis fizikoje

Fizikoje labai daug sistemų elgiasi (bent apytiksliai) kaip harmoninis osciliatorius. Dažnai fizikiniams reiškiniams paaiškinti naudojame osciliatoriaus modelį. *Osciliatorius yra* bet kokia fizikinė (mechaninė, elektromagnetinė, kvantinė) *sistema, virpanti apie pusiausvyros padėtį*. Jei svyruojančios apie pusiausvyros padėtį sistemos gražinančioji jėga yra tiesiog proporcinga poslinkiui, tai sistema yra *tiesinis osciliatorius* arba *paprastasis harmoninis osciliatorius*.



2 pav. Harmoninio osciliatoriaus fizikiniai pavyzdžiai: spyruoklė (a), švytuoklė (b) ir dalelė paraboliniame potencialiniame lauke

Paprasčiausias modelis, kuris padeda suprasti spinduliavimo mechanizmą yra tiesinio harmoninio osciliatoriaus modelis. Kai toks osciliatorius sužadinamas, jis išspinduliuoja vorą elektromagnetinio spinduliavimo bangų kartu prarasdamas savo energiją. Šiame modelyje neutralus atomas laikomas harmoninių osciliatorių (virpančių įvairiais dažniais dipolių) visuma.

Kvantinė mechanika yra fundamentali fizikos teorija, kurios idėjomis ir metodais grindžiami visi šiuolaikiniai fizikos mokslai. Vystantis mokslui, kuriant naujas technologijas, kvantinės mechanikos reikšmė ir jos pritaikymo sritys plečiasi.

Kompiuterinės įrangos panaudojimas kvantinės mechanikos procesų bei reiškinių nagrinėjime yra visuotinai pripažintas. Abstrakščių, neklasikinėmis sąvokomis aprašomų kvantinių reiškinių tyrimas pasitelkiant kompiuterinį modeliavimą ne tik sudomina savo vaizdumu, bet ir suteikia gilesnį šių reiškinių supratimą bei jų skaitinės analizės rezultatus.

Pavyzdžiui, osciliatoriaus įvaizdžiais rėmėmės optikoje, aiškindami šviesos sklaidą ir absorbciją, dispersiją arba absoliučiai juodo kūno spinduliavimą bei kitus reiškinius. Harmoninio osciliatoriaus modelis plačiai naudojamas atomų ir molekulių spektroskopijoje (Cowan, 1997).

Kvantinis osciliatorius – mechaninės švytuoklės kvantinis analogas, jo analizė ir kompiuteriniai modeliai plačiai taikomi šiuolaikinėje dalelių fizikoje, branduolinėje energetikoje ir net kvantinėje elektronikoje. Šis modelis yra plačiai taikomas, pavyzdžiui, juo aiškinamos fononinės kietųjų kūnų savybės, elementarieji elektromagnetinio lauko sužadinimai lauko teorijoje ir t.t. Tokių svyravimų pavyzdžiu kvantinėje mechanikoje yra atomų virpesiai molekulėse.

2.1. Tiesinis harmoninis osciliatorius

Pirmiausiai išnagrinėkime paprasčiausią ir populiariausią osciliatoriaus modelį – harmoninį osciliatorių. *Tiesiniu harmoniniu osciliatoriumi* vadinama m masės dalelė, kuri juda išilgai tam tikros ašies, veikiama kvazitamprumo jėgos F, proporcingos dalelės nuokrypiui nuo pusiausvyros padėties:

$$F = -kx, \tag{1}$$

čia k – tamprumo koeficientas, susijęs su dalelės mase ir jos virpesių savuoju cikliniu dažniu, ω_0 t.y. $k = m\omega_0^2$.

Trumpai prisiminkime, kaip tokia sistema nagrinėjama klasikinėje mechanikoje. Pagal Hamiltoniano funkciją sudaromos judėjimo lygtys:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial}{\partial p} H = \frac{p}{m} = v, \tag{2}$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial}{\partial x} H = -kx. \tag{3}$$

Hamiltoniano funkcija priklauso nuo abiejų kintamųjų, t.y. koordinatės x ir judesio kiekio p. Pirmoji lygtis yra tiesiog osciliatoriaus greičio v apibrėžimas. Diferencijuodami dar kartą (2) lygtį pagal laiką ir įstatę judesio kiekio išvestinę iš (3) lygties, gauname lygtį osciliatoriaus koordinatei

$$m\frac{d^2x}{dt^2} + kx = 0. \tag{4}$$

Jos sprendinys

$$x(t) = a\sin(\omega_0 t + \varphi);$$

$$p(t) = am\omega_0 \cos(\omega_0 t + \varphi), \tag{5}$$

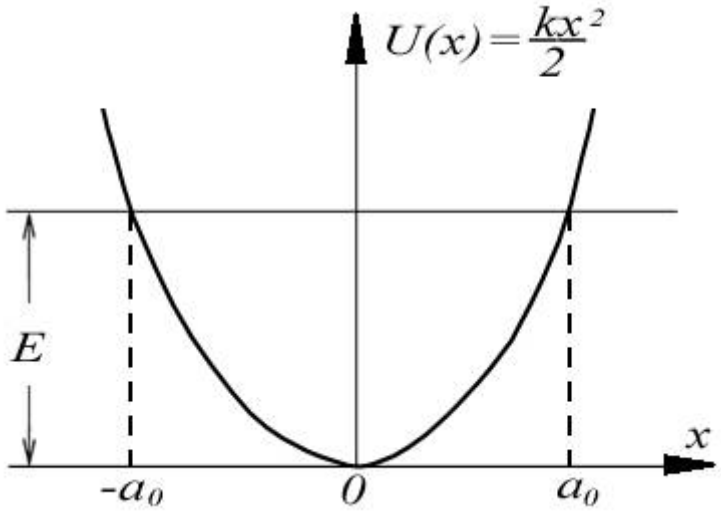
čia $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ yra savasis osciliatoriaus dažnis.

Sprendinio dėka galima nustatyti osciliatoriaus padėtį ir jo greitį bet kuriuo laiko *t* momentu. Tai ir vadinama *klasikinė osciliatoriaus trajektorija.*

Šio osciliatoriaus potencinė energija:

$$U(x) = \frac{kx^2}{2} = \frac{m\omega_0{}^2 x^2}{2}. \qquad (6)$$

Tokiu būdu kvantmechaninis uždavinys apie harmoninį osciliatorių susiveda į uždavinį apie apie dalelės judėjimą paraboliniame potencialiniame lauke. Pirmiausiai išnagrinėkime klasikinio harmoninio osciliatoriaus savybes. Tegu dalelė, kurios pilnutinė energija *E* atlieka svyravimus potencialinių jėgų lauke (6). Dalelė, svyravimus atlieka potencialinės duobės viduje, t. y. intervale $[-a_0, a_0]$, už potencialinės duobės ribų judėjimas yra negalimas. Svyravimų amplitudė lygi $a_0 = \sqrt{\frac{2E}{m_0\omega_0^2}}$.



3 pav. Klasikinio osciliatoriaus potencinė energija

Harmoninio osciliatoriaus amplitudė, esant mažiems svyravimams, klasikinėje mechanikoje yra sąlygojama jo energijos atsarga. Klasikinės fizikos požiūriu mažų svyravimų amplitudė nustatoma pasinaudojant jo pilnutine energija *E*. (3 pav.). Taškuose, kurių x koordinatės yra $-a_0$ ir a_0, osciliatoriaus kinetinė energija lygi nuliui, tai pilnutinė energija *E* lygi jo potencinei energijai $E = U(x)$:

$$E = \begin{cases} U(a_0) \\ U(-a_0) \end{cases}. \qquad (7)$$

Čia x – klasikinio harmoninio osciliatoriaus svyravimų amplitudė.

Toks osciliatorius už intervalo $[-a_0, a_0]$ ribų pasislinkti negali. Jei dalelė, judėtų už šio intervalo ribų tai reikštų, kad jos potencinė energija būtų didesnė už jos pilnutinę

energiją. Tačiau, tai neįmanoma, nes tuomet sektų tokia išvada, kad kinetinė energija yra neigiama.

Vadinasi, klasikinis osciliatorius nagrinėjamas potencialinėje duobėje su koordinatėmis, kurios kinta intervale $-a_0 \le x \le a_0$.

Klasikinė tikimybė $\omega_{kl}(x)dx$ aptikti osciliatorių intervale $x, x+dx$ apskaičiuojamas, kaip santykis laiko dt ir judėjimo periodo $T = \frac{2\pi}{\omega_0}$:

$$\omega_{kl}(x)dx = \frac{dt}{T} = \frac{\omega_0}{2\pi}\frac{dx}{\vartheta}, \tag{8}$$

čia ϑ - dalelės judėjimo greitis, kurį išreiškiame kaip koordinatės x funkciją. Turime, kad klasikinio harmoninio osciliatoriaus svyravimų koordinatė x lygi $x=a\sin(\omega_0 t)$, o svyravimų amplitudė a lygi $a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}}$.

Taigi, dalelės judėjimo greitis

$$\vartheta = a\omega_0 \cos(\omega_0 t) = a\omega_0\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}\ . \tag{9}$$

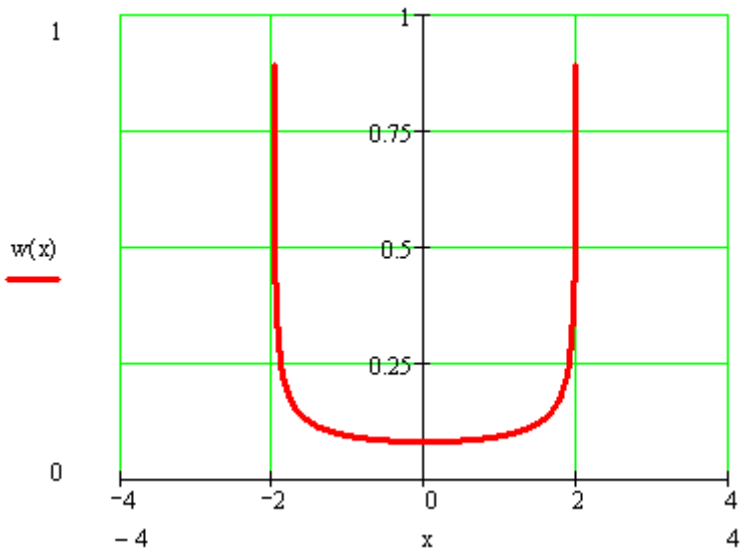
Klasikinė tikimybė $\omega_{kl}(x)dx$ aptikti osciliatorių intervale $x, x+dx$ apskaičiuojamas

$$\omega_{kl}(x)dx = \frac{dt}{T} = \frac{1}{2\pi a}\frac{dx}{\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}}, \text{ kai } -a_0 \le x \le a_0. \tag{10}$$

Vadinasi, funkcija

$$\omega_{kl}(x)dx == \frac{1}{2\pi a}\frac{1}{\sqrt{1-\frac{x^2}{a^2}}}, \text{ kai } -a_0 \le x \le a_0 \tag{11}$$

nusako tikimybę aptikti dalelę intervale $x, x+dx$. Šios funkcijos grafikas pateikiamas 4 pav.



4 pav. Klasikinio osciliatoriaus tikimybės tankis, kai a_0 kinta intervale [-2, 2]

2.2. Osciliatoriaus modelis kvantinėje fizikoje

Nagrinėjant harmoninio ir anharmoninio osciliatorių sąveikos su išoriniu elektromagnetiniu lauku savybes, skiriamas didelis dėmesys spinduliavimo kvantinei teorijai. Nagrinejant šiuos procesus randamas ryšys su koherentinės optikos problemomis ir lazerių fizika. Pavyzdžiui, osciliatoriaus įvaizdžiais rėmėmės optikoje, aiškindami šviesos sklaidą ir absorbciją, dispersiją bei kitus reiškinius. Harmoninio osciliatoriaus modelis plačiai naudojamas atomų ir molekulių spektroskopijoje.

Spinduliuoja dujiniai, skystieji ir kietieji kūnai, tiksliau – juos sudarantys atomai ir molekulės. Paprasčiausias modelis, kuris padeda suprasti spinduliavimo mechanizmą yra tiesinio harmoninio osciliatoriaus modelis. Kai toks osciliatorius sužadinamas, jis išspinduliuoja vorą elektromagnetinio spinduliavimo bangų kartu prarasdamas savo energiją. Neutralus atomas nagrinėjamas kaip harmoninių osciliatorių (virpančių įvairiais dažniais dipolių) visuma. Atskiros apie 3 m ilgio spinduliuotės voros išlekia iš osciliatorių maždaug per 0,1 ns, kol vyksta atomo sužadinimas.

Tiriant absoliučiai juodo kūno spinduliavimą, pasinaudojame kūno teoriniu modeliu, kurį sudaro visais galimais dažniais virpančių harmoninių osciliatorių begalinė sistema. Pagal klasikinę elektrodinamiką kiekvienas toks osciliatorius spinduliuoja jo virpesių dažnio elektromagnetines bangas. Be to, pagal šią teoriją kiekvienos sistemos energija gali kisti tolydžiai, t.y. sistema gali išspinduliuoti bet kokias energijos vertes.

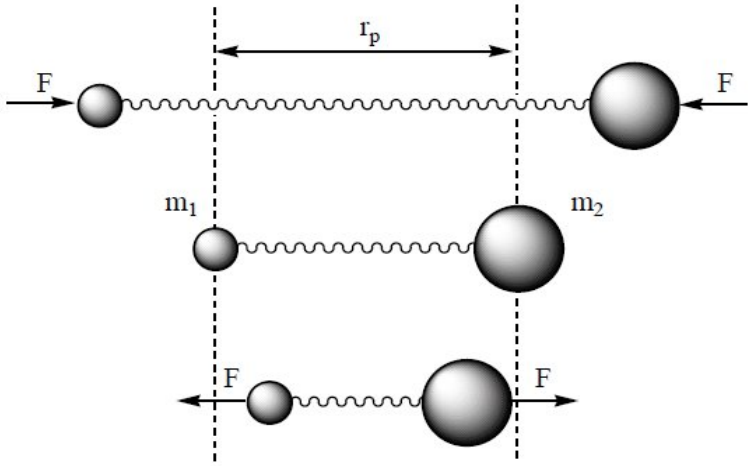
Klasikinės fizikos pagrindus 1900 m. peržiūrėjo Plankas. Jis iškėlė mintį, kuri iš esmės prieštaravo klasikinės statistinės fizikos ir elektrodinamikos įvaizdžių sistemai. Jo hipotezė teigia, kad elektromagnetinė spinduliuotė spinduliuojama ne tolygiai, o atskiromis porcijomis (kvantais), kurių energijos dydis proporcingas dažniui:

$$\varepsilon = h\nu = h\frac{c}{\lambda}. \qquad (12)$$

Planko hipotezė aiškiai prieštarauja klasikinės fizikos dėsniams, nes iš jų išplaukia, kad visi dydžiai (energija, impulsas) gali laisvai įgyti bet kokias kiek norima mažas vertes ir gali kisti tolygiai. Pagal klasikinius dėsnius tam tikro dažnio osciliatorius gali turėti savyje įvairią energiją, kuri proporcinga amplitudės kvadratui. Tai reiškia, kad osciliatorius per vienetinį laiką gali spinduliuoti bet kokį energijos kiekį. Teoriškai modeliuojant juodąjį kūną kaip begalinę harmoninių osciliatorių visumą, kiekvienas iš kurių skleidžia atskirą monochromatinę bangą, o visi kartu – ištisinę spinduliuotę.

2.3. Osciliatoriaus modelis – molekulinėse sistemose

Vibracinius judesius molekulinėse sistemose galima modeliuoti pasinaudojant mechaniniais modeliais, pritaikant jiems energijos kvantavimo taisykles. Paprasčiausias modelis yra harmoninis osciliatorius, kuris yra sujungtų spyruokle dviejų kūnų, kurių masės m_1 ir m_2, sistema (5 pav.).



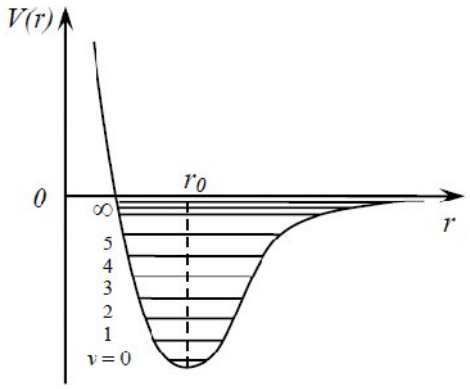
5 pav. Harmoninio osciliatoriaus svyravimai

Pasinaudodami šiuo klasikiniu osciliatoriaus modeliu galima nagrinėti atomų virpesius diatomėje molekulėje. Atomus, kurių masės m_1 ir m_2, pavaizduosime skirtingo

spindulio apskritimais, o tarpatominę jėgą — spyruokle, kaip parodyta brėžinyje žemiau. Visas koordinates atskaitysime atomų centrų x_1 ir x_2 atžvilgiu.

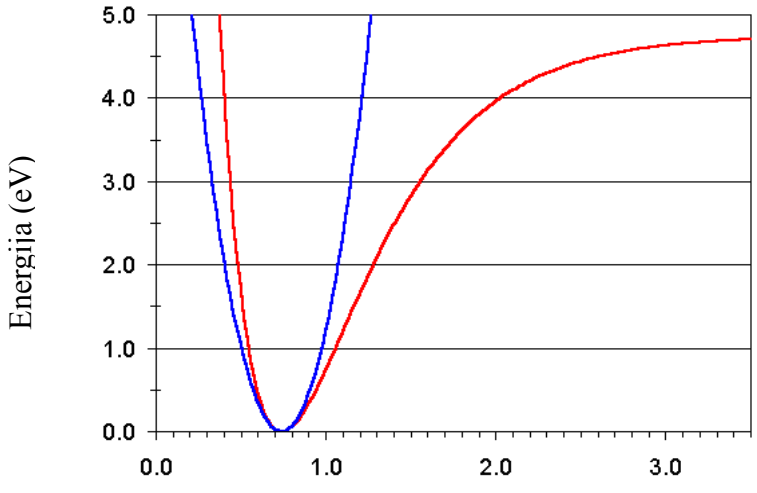


Tarkime, kad ryšys tarp atomų molekulėje yra tamprusis. Tuomet atomų sąveikos potencinė energija V(r), kaip nuotolio r tarp jų centrų funkcija vaizduojama:



6 pav. Atomų sąveikos potencinė energija

Nuotoliui tarp atomų centrų pakitus dydžiu (r-r_0), atsiranda link pusiausvyros padėties nukreipta kvazitamprioji jėga – dėl to kiekvieno atomo branduolys virpa apie savo pusiausvyros padėtį (r=r_0) . Jeigu virpesių amplitudė, palyginti su r_0 yra labai maža, tai jie yra *harmoniniai* ir jiems tinka *harmoninio osciliatoriaus dėsningumai*.



7 pav. Mėlyna kreivė – tiesinio harmoninio osciliatoriaus potencinė energija $U(x)=\frac{kx^2}{2}$. Raudona kreivė – atomų sąveikos potencinė energija $U(r)=\frac{1}{2}k(r-r_0)^2$

Tokio *osciliatoriaus energija* išreiškiama lygtimi:

$$W_\nu = \left(\nu + \frac{1}{2}\right) h\nu_0 \quad , \text{kai } \nu = 0,1,2,\ldots, \tag{13}$$

čia ν– vibracinis kvantinis skaičius, ν_0 – nuo virpančios dalelės masės *m* ir sistemos kvazitampriosios konstantos *k* priklausantis virpėjimo savasis dažnis:

$$\nu_0 = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{k}{m}}\,. \tag{14}$$

Iš energijos formulės seka, kad *nuotolis tarp gretimų vibracinės energijos lygmenų* yra vienodas ir lygus:

$$W_{\nu+1} - W_\nu = h\nu_0\,. \tag{15}$$

Nustatyta, kad priklausomai nuo molekulės prigimties šis skirtumas yra 10^{-2}–10^{-1} *eV* eilės. Tokio osciliatoriaus spinduliniams šuoliams tarp vibracinės energijos lygmenų galioja atrankos taisyklės $\Delta\nu = \pm 1$. Tačiau esant dideliems *v* (didelė branduolio virpėjimo amplitudė), atomų sąveikos potencinė energija $V(r)$ kinta ne parabolės dėsniu, – virpesiai yra jau *anharmoniniai*.

Tuomet vibracinės energijos lygmenys jau nevienodai nutolę vienas nuo kito, o didėjant *v*, tankėja (6 pav.). Be to, anharmoniniam osciliatoriui jau galimi kvantiniai šuoliai, kuriuose Δv gali būti didesnis už 1. Tačiau šitokių spektro linijų intensyvumas nedidelis ir mažėja didėjant Δv.

Molekulės elektronų lygmenys – tai atomo energijos lygmenys, kurie labiausiai priklauso nuo pagrindinio kvantinio skaičiaus *n*. Kai kvantinio šuolio metu kinta *n*, tai elektronų energijos pokytis ΔW_e yra keleto *eV* eilės ir gaunamas regimasis ar ultravioletinis spinduliavimas.

3. Vienmatis kvantinis osciliatorius

3.1. Hamiltonianas ir jo savybės

Pasinaudodami pagrindiniais kvantinės mechanikos principais, iš Hamiltoniano funkcijos gauname Hamiltoniano operatorių. Šitokio osciliatoriaus Hamiltoniano operatorius yra

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{4\pi^2 m\nu^2}{2}x^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2. \qquad (16)$$

Dalelė, kurios hamiltonianas turi tokį pavidalą vadinama vienmačiu *kvantiniu harmoniniu osciliatoriumi.*

Šios sistemos Hamiltonianas nepriklauso nuo laiko, tai kvantinio osciliatoriaus analizė suvedama į tikrinių verčių lygties sprendimą. Tuomet ir stacionarioji Šredingerio lygtis nepriklauso nuo laiko ir užrašoma šitaip:

$$\hat{H}\varphi = E\varphi, \qquad (17)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2\varphi = E\varphi, \qquad (18)$$

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\varphi = 0. \qquad (19)$$

Išskirkime keletą svarbių Hamiltoniano savybių, kurias apsprendžia potencialo forma $V = \frac{kx^2}{2}$:

1. *Hamiltoniano tikrinės vertės įgyja teigiamas vertes.* Bendruoju atveju galima parodyti, kad potencinė energija V(x) apribota iš apačios, tai Hamiltoniano $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2$ tikrinės vertės E viršija minimalią funkcijos V(x) reikšmę: $E > V_{min}$, jei $V(x) \geq V_{min}$.

2. *Hamiltoniano $\hat{H}$ operatoriaus tikrinės funkcijos turi apibrėžtą lyginumą*. Šį savybė seka iš funkcijos V(x) lyginumo savybės: $V(-x)=V(x)$. Šiuo atveju operatoriaus $\hat{H}$ tikrines funkcijas galime rasti tarp funkcijų su nustatytu lyginumu (iš tikrųjų, Hamiltoniano tikrinės vertės nėra išsigimųsios, vadinasi stacionariąsias būsenas aprašančios banginės funkcijos turi būti arba lyginės, arba nelyginės).
3. *Energijos spektras yra diskretinis.* Klasikinė dalėlė juda apribotoje srityje nepriklausomai nuo pilnutinės enrgijos reikšmės ir tuo atveju Hamiltoniano tikrinės vertės išsidėsto diskretiškai.

3.2. Kvantinio osciliatoriaus būsenų energijos spektras

Šis kvantmechaninis uždavinys apie harmoninį osciliatorių suvedamas į uždavinį apie dalelės judėjimą kvantinėje duobėje, kurios pavidalas formuojamas parabolinio tipo potencine energija. Nagrinėjant šį uždavinį svarbu nustatyti šios sistemos bangines funkcijas ir energijos spektrą, t.y. nustatyti Hamiltoniano tikrines vertes ir tikrines funkcijas.

Kvantinės mechanikos harmoninio osciliatoriaus svyravimai yra reiškiami šia stacionaria Šrėdingerio lygtimi:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-\frac{m\omega^2}{2}x^2\right)\varphi=0. \tag{20}$$

Įvesime naujus bedimensinius kintamuosius:

$$x_0=\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}},\ \xi=\frac{x}{x_0},\ \lambda=\frac{2E}{\hbar\omega}. \tag{21}$$

Šredingerio lygtis su naujaisiais kintamaisiais pasidaro paprastesnė ir gerai žinoma diferencialinių lygčių teorijoje:

$$\varphi''+\left(\lambda-\xi^2\right)\varphi=0. \tag{22}$$

Nagrinėdami kvantinį osciliatorių teigiame, kad banginė funkcija be galo nutolusiuose į abi puses taškuose, $x=-\infty$ ir $x=+\infty$, yra lygi nuliui. Priešingu atveju integralas $\int|\varphi(x)|^2dx$ diverguos. Pasirodo, kad banginės funkcijos kraštines sąlygas patenkina ne visada, o tik esant tam tikriems diferencialinės lygties parametrams. Taigi,

tikrasis uždavinys yra ne tik išspręsti pateiktą diferencialinę lygtį su iš fizikinių samprotavimų gaunamomis kraštinėmis sąlygomis, bet ir tuo pačiu metu nustatyti energijos vertes *E*, kurioms esant tik ir egzistuoja ieškomasis sprendinys.

Šio uždavinio ypatybė yra ta, kad dalelės judėjimas nėra apribotas kokia tai nepralaidžiama sienele, todėl šiuo atveju nėra kraštinių sąlygų. Vienintelis banginės funkcijos reikalavimas, kad ji visoje egzistavimo srityje turi būti *kvadratiškai integruota.* (Funkcija Ψ vadinama *kvadratiškai integruotina,* jeigu dydžio $\Psi\Psi^*$ integralas visame kintamųjų intervale yra baigtinis).

Kvantinį osciliatorių aprašanti Šredingerio lygtis turi sprendinį, kuris tenkina paskutinįjį reikalavimą, tik prie tam tikrų parametro λ reikšmių.

Norint išsiaškinti (22) lygties bendrojo sprendinio pavidalą, reikalaujame kad funkcija būtų baigtinė, kai $\xi \to +\infty$.

Išnagrinėkime funkcijos $\varphi(\xi)$ pavidalą prie didelių parametro reikšmių $\xi >> \lambda$. Šiuo atveju (22) lygtis įgyja tokį pavidalą

$$\varphi'' - \xi^2 \varphi = 0 . \tag{23}$$

Asimptotinis sprendinys prie didelių parametro ξ verčių yra funkcija

$$\varphi = e^{\pm\frac{\xi^2}{2}} . \tag{24}$$

Banginė funkcija turi būti baigtinė, ir apibrėžta tai lieka tiktai vienas sprendinys

$$\varphi = e^{-\frac{\xi^2}{2}} . \tag{25}$$

Iš šio rezultato gauname, kad (22) lygties sprendinys yra funkcija

$$\varphi = e^{-\frac{\xi^2}{2}} f(\xi), \tag{26}$$

$f(\xi)$ - nauja nežinoma funkcija.

Įstatę (26) lygtį į (22), nagrinėjame šią lygtį

$$f'' - 2\xi f' + (\lambda - 1) f = 0 . \tag{27}$$

Šios lygties sprendinio ieškosime laipsninės eilutės pavidalu

$$f(\xi) = \sum_{k=0} a_k \xi^k . \tag{28}$$

Funkcijos išvestinės f'', f' yra lygios

$$f' = \sum_{k=0} k a_k \xi^{k-1}, \tag{29}$$

$$f'' = \sum_{k=0} k(k-1)a_k \xi^{k-2} \ . \tag{30}$$

Įstatę (29) ir (30) lygtis į (27) gauname

$$\sum_{k=0} k(k-1)a_k \xi^{k-2} - 2\xi \sum_{k=0} k a_k \xi^{k-1} + (\lambda - 1)\sum_{k=0} a_k \xi^k = 0 . \tag{31}$$

Žinome, kad begalinės laipsninės eilutės suma tapatingai lygi nuliui, tuomet kai prie visų nepriklausomų kintamųjų laipsnių esantys koeficientai lygūs nuliui. Prilyginę koeficientų sumą nuliui, gauname rekurentinį ryšį koeficientams a_k:

$$\sum_{k=0} \left(k(k-1)a_{k+2} - (2ka_k + 1 - \lambda)\right)\xi^k = 0 \tag{32}$$

ir

$$(k+2)(k+1)a_{k+2} - (2ka_k + 1 - \lambda) = 0 . \tag{33}$$

Taigi, gauname šį rekurentinį ryšį koeficientams a_k

$$a_{k+2} = \frac{2k+1-\lambda}{(k+2)(k+1)} a_k \ . \tag{34}$$

Gauname sprendinį, kuris tenkina būtiną sąlygą – baigtinumą tik tuo atveju, kai laipsninė eilutė susivedama į polinomą, t. y. ties kažkuriuo nariu eilutė nutrūksta. Tai, teigiame kad paskutinis eilutės narys bus su numeriu *n*: $a_n \neq 0$, $a_{k+2} = 0$. Tuomet funkcija $f(\xi)$ susiveda į n-tojo laipsnio polinomą. Ši prielaida bus tenkinama, kai

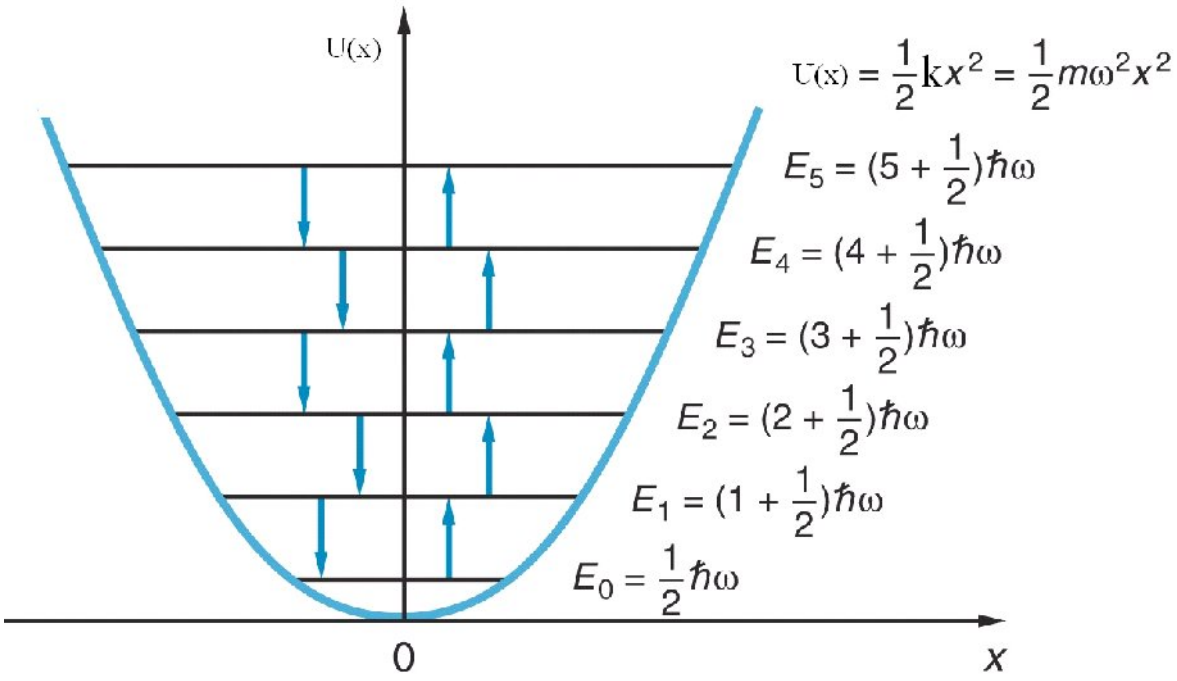
$$\lambda = 2n + 1 , \tag{35}$$

čia $n = 0,1,2,3....$, $n \geq 0$, nes n – eilutės nario numeris ties kurio eilutė nutrūksta.

Vadinasi, (22) lygties sprendinys yra *vienareikšmis, baigtinis ir tolydinis* tik jei $\lambda = 2n+1$ ($n = 0, 1, 2, 3 ...$). Tai apibrėžia energijos spektro vertes, t. y. harmoninio osciliatoriaus tikrines vertes

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right). \tag{36}$$

Iš čia matyti, kvantinio osciliatoriaus energija gali turėti tik tam tikras diskretinias vertes. Svarbu pažymėti, kad parabolinėje duobėje energetinės būsenos išsidėsto vienodu tarpu ir tokiai sistemai yra būdingas parametras – *osciliatoriaus kvantas* $\hbar\omega$.



8 pav. Kvantinio osciliatoriaus būsenų energetinių lygmenų schema

Kvantinio osciliatoriaus minimali energijos vertė gaunama, kai $n = 0$ ir ji atitinkamai lygi:

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}. \tag{37}$$

Ši mažiausia energija, kurią gali turėti kvantinis osciliatorius yra vadiname *nuline energija.* Ji turi ne tik fizikinę prasmę, bet ir filosofinę prasmę.

Anot klasikiniu supratimu, absoliutinio nulio temperatūroje sistemos dalelė turi minimalią energija lygia nuliui. Šiuo atveju, bet koks mechaninis judėjimas nutrūksta, tai ir klasikinis osciliatorius nesvyruoja ir yra pusiausvyros būsenoje. Pagal klasikinę teoriją, atomai osciliatoriai esant $T = 0$ turi nesvyruoti.

Šiuolaikinė kvantinė mechanika įrodė, kad atomai osciliatoriai ir esant $T = 0$ turi energijos. Formulė (37) patvirtina, kad kvantinis osciliatorius esant net labai žemoje temperatūroje $T \to 0$ nėra pusiausvyros būsenoje, nes jis turi nulines energijos.

Kvantinio osciliatoriaus sąvoka yra svarbi kietojo kūno fizikai, elektromagnetiniam spinduliavimui, molekulių vibraciniams spektrams ir kt. Bandymai rodo, kad kristalo atomų virpėjimo sąlygojama šviesos sklaida net labai žemoje temperatūroje $T \to 0$ neišnyksta, taigi neišnyksta ir atomo virpesiai. Tai sutampa su kvantinės mechanikos teorine išvada. Pagal kvantinę mechaniką nulinė energija yra mikrodalelės korpuskulinio banginio dualumo išvada (Požėla, 2008).

3.3. Kvantinio osciliatoriaus būsenų banginės funkcijos

Banginė funkcija Ψ(x, y, z, t) ir jos amplitudė tiesiogiai eksperimentiškai *nestebimi* ir *fizikinės prasmės* neturi. Dalelės ***banginė funkcija*** – tai koordinačių ir laiko kompleksinė funkcija Ψ(x, y, z, t), kuri apibūdina dalelės judėjimo būseną ir kurios modulio kvadratas lygus tikimybės tankiui aptikti duotosios būsenos dalelę erdvės taške su koordinatėmis x, y ir z laiko momentu t:

$$|\Psi|^2 = \frac{dP}{dV} \quad \text{arba} \quad dP = |\Psi|^2 dV . \tag{38}$$

Šioje banginės funkcijos apibrėžime reikia atkreipti dėmesį į teiginį, jog banginė funkcija apibūdina dalelės judėjimo būseną. Tai reiškia, kad, uždavus banginę funkciją, kartu visiškai apibūdinamas dalelės judėjimas visais laiko momentais. Skirtingų energijų dalelės turi skirtingas bangines funkcijas.

Užrašykime osciliatoriaus Hamiltoniano *n*-tojo sužadinto energetinio lygmens tikrines funkcijas

$$\varphi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi), \tag{39}$$

čia A_n - normavimo daugiklis, $H_n(\xi)$- n-tojo laipsnio polinomai dažnai išreiškiami

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d_n \xi} . \tag{40}$$

Polinomus $H_n(\xi)$ vadiname *Ermito (Hermite)* polinomais, kurie apibrėžiami sąryšiu:

$$H_{n+1}(\xi) + 2H_n(\xi) - 2nH_{n-1}(\xi) = 0 . \tag{41}$$

Iš čia galime rasti polinomų $H_n(\xi)$ išraiškas prie visų n verčių ($n = 0, 1, 2, 3 \ldots$):

$$\begin{aligned} &H_0(\xi) = 1 , \; H_1(\xi) = 2\xi , \\ &H_2(\xi) = 2\xi H_1(\xi) - 2H_0(\xi) = 4\xi^2 - 2 , \\ &H_3(\xi) = 2\xi H_2(\xi) - 4H_1(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi \; \ldots . \end{aligned} \tag{42}$$

Prisimenant, kad banginė funkcija yra lygties (22) sprendinys, tai ji turi tenkinti ne tik standartines sąlygas: *vienareikšmė, baigtinė ir tolydinė, bet ir būti kvadratiškai integruotina ir tenkinti normavimo sąlygą:*

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(\xi)\varphi_n^*(\xi)d\xi = 1\,. \tag{43}$$

Pasinaudodami (39) ir (40) išraiškomis normavimo sąlygą gauname

$$A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi)d\xi = (-1)^n A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} H_n(\xi)\frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\,\xi^n} = 1\,. \tag{44}$$

Atlikę skaičiavimus normavimo daugiklio išraiką gauname:

$$A_n = \frac{1}{\sqrt{2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}}\,. \tag{45}$$

Pasinaudodami bedimensiniu dydžiu $\xi = \frac{x}{x_0}$, iš čia $x = x_0\xi$. Tai banginės funkcijos normavimo daugiklis bus

$$\widetilde{A}_n = \frac{1}{\sqrt{x_0 2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}}\,. \tag{46}$$

Vadinasi, banginę funkciją galime užrašyti

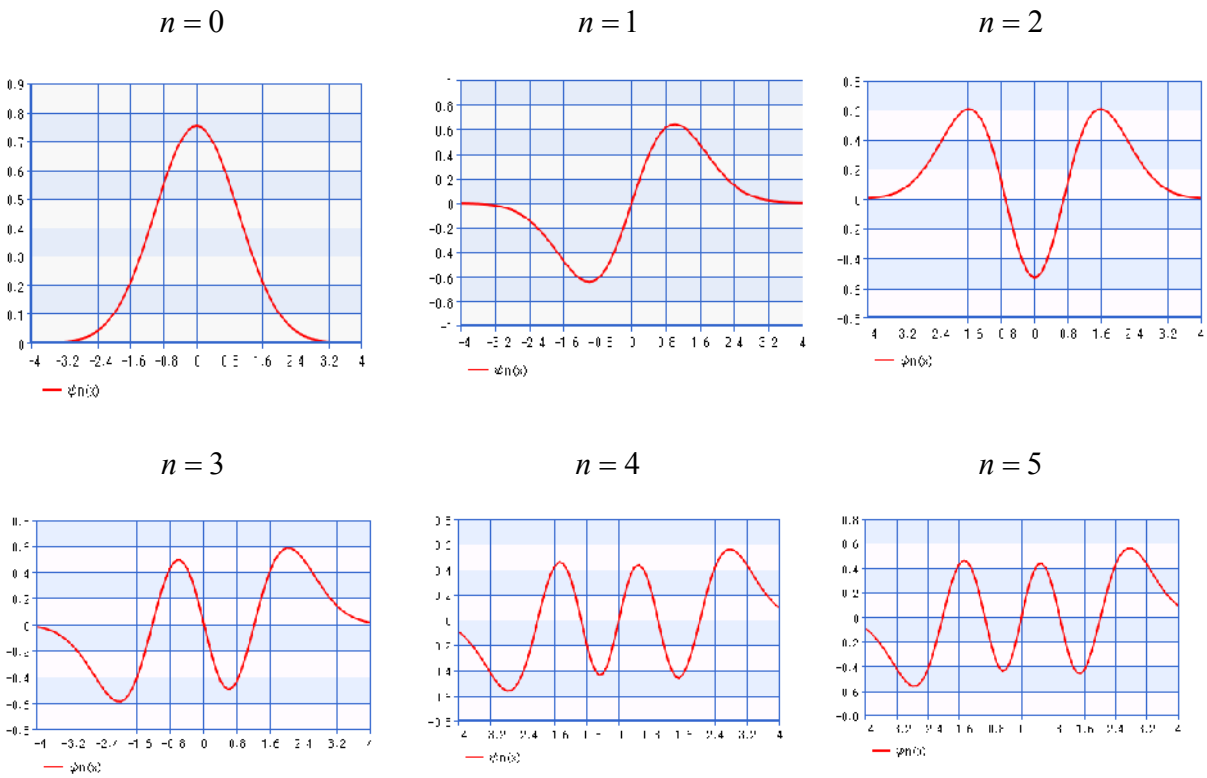
$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0 2^n \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}} \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}} \cdot H_n(\xi). \tag{47}$$

Pateikiame banginių kvantinio osciliatoriaus tikrinių funkcijų algebrines išraiškas ir kreives kai *n* vertės yra mažos.

$$n = 0, \qquad \varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0 \cdot \sqrt{\pi}}} exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right);$$

$$n = 1, \qquad \varphi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2x_0 \cdot \sqrt{\pi}}} \frac{2x}{x_0} exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right);$$

$$n = 2, \qquad \varphi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{8x_0 \cdot \sqrt{\pi}}} \left(\frac{4x^2}{x_0^2} - 2\right) exp\left(-\frac{x^2}{2x_0^2}\right). \tag{48}$$

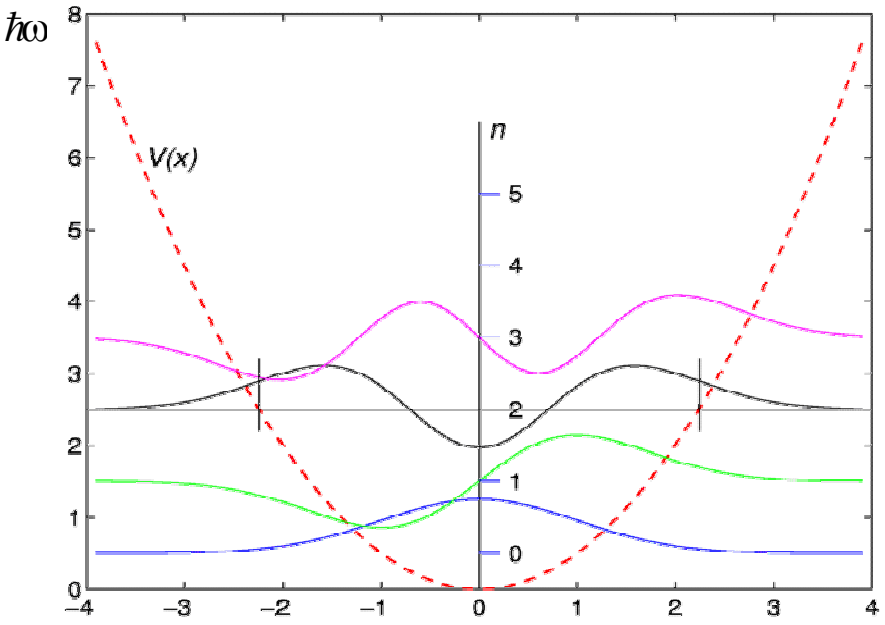


9 pav. Kvantinio osciliatoriaus normuotos tikrinės funkcijos, kai n vertės mažos

Pateikiami kvantinio osciliatoriaus tikrinių funkcijų grafikai, kai energetinio lygmens būsenos n kinta nuo 0 iki 5 intervale [-4, 4].

Pagrindinės būsenos banginė funkcija yra gausinis varpas, kurio plotį apibrėžia parametras a. Ši banginė funkcija neturi mazgų. Sekančio lygmens ($n = 1$) banginė funkcija turi vieną mazgą, $n = 2$ turi du mazgus. Kaip matyti iš (48) formulių kvantinio osciliatoriaus banginės funkcijos yra gausinės eksponentinės funkcijos ir n-tojo laipsnio polinomo sandaugos.

Taškai, kuriuose banginė funkcija lygi nuliui vadinami banginės funkcijos mazgais. Matome, kad banginės funkcijos mazgų skaičius lygus lygmens skaičiui n. Todėl n-tojo lygmens banginė funkcija turi n mazgų. Kvantinio osciliatoriaus banginėms funkcijoms būdingas *lyginumas*. Jos yra lyginės funkcijos prie lyginių n verčių ir prie $n = 0$, o nelyginės funkcijos prie nelyginių n verčių.



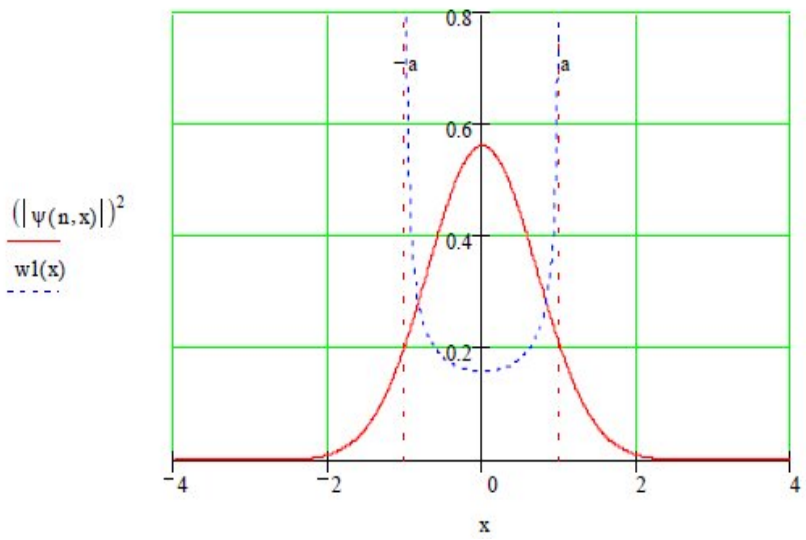
10 pav. Tikrinių funkcijų grafikai, kai $n = 0, 1, 2, 3$

Pateikiami tikrinių funkcijų grafikai ir jas atinkančios energijos tikrinės vertės, kai n kinta 0 iki 3. Svarbu pažymėti, kad pabolinėjė duobėje energinės būsenos vienodais tarpais ir atstumas tarp būsenų lygus $\hbar\omega$. Energinės būsenos $n = 2$ lygmenyje esančios mažos vertikalios (juodos) linijos rodo ribas tarp klasikinės fizikos ir kvantinės mechanikos. Matome, kad kvantinio osciliatoriaus banginė funkcija, kai $n = 2$ už pažymėtos ribos yra nelygi nuliui. Vadinasi, kvantinis osciliatorius su nustatyta tikimybe gali būti už parabolinės duobės ribų.

Esant mažoms kvantinio skaičiaus n vertėms tikimybė aptikti dalelę yra lygi banginės funkcijos modulio kvadratui, ji visiškai skiriasi nuo klasikinio osciliatoriaus tikimybės tankio

$$dP = \left|\varphi_n(x)\right|^2 dx\,. \tag{49}$$

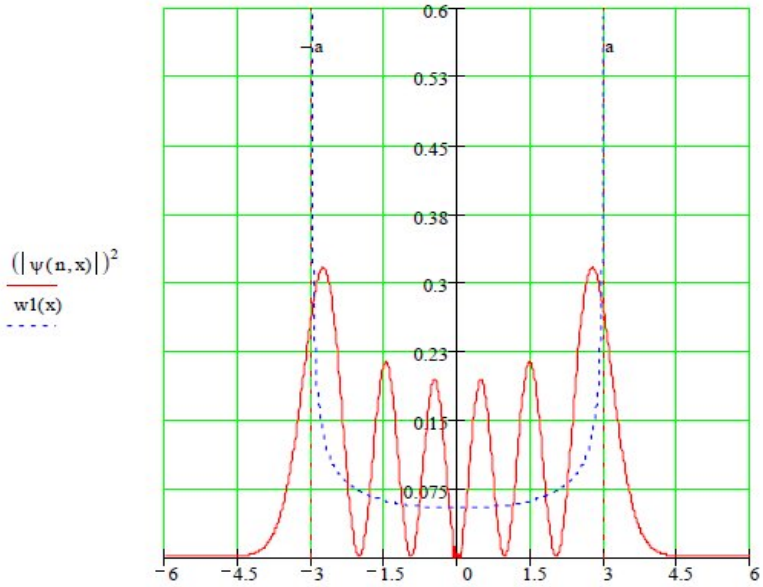
Pagrindinės būsenos funkcijos modulio kvadratas yra Gauso pasiskirstymas ir pateikiame 11 paveiksle:



11 pav. Raudona kreivė – Kvantinio osciliatoriaus pagrindinės būsenos tikimybės tankis, kai $n = 0$. Mėlyna kreivė – klasikinio osciliatoriaus tikimybės tankis

Iš 11 pav. matome, kad kvantinės dalelės tikimybės tankio maksimumas yra taške $x = 0$, tuomet kai klasikinio osciliatoriaus tikimybės tankis šiame taške turi minimumą. Klasikinė dalelė šiame taške turi didžiausią greitį ir jos aptikimo tikimybė yra mažiausia.

Prie didelių n verčių kvantinio osciliatoriaus tikimybės tankio kreivė vis daugiau panaši į klasikinio osciliatoriaus tikimybės tankio kreivę 12 paveiksle.



12 pav. Raudona kreivė – kvantinio osciliatoriaus tikimybės tankis kai $n = 5$, mėlyna klasikinio osciliatoriaus timybės tankis

Atlikę kvantinės dalelės judėjimo parabolinėje potencialinėje duobėje teorinę analizę ir palyginę su jos judėjimu stačiakampėje potencialinėje duobėje, nepriklausomai nuo duobės formos galima išskirti šiai dalelei būdingų bendrų savybių:

a) dalelės, esančios potencialinėje duobėje, energijos spektras yra diskretinis, t.y. dalelės energijos vertės yra kvantuotos;
b) dalelės, esančios pagrindinėje būsenoje, energija yra nelygi nuliui;
c) dalelės timybės tankis eksponentiškai mažėja, už klasikinės dalelės tikimybės tankio ribų. Vadinasi, kvantinė dalelė su tam tikra timybe gali būti už potencialinės duobės ribų;
d) didėjant kvantiniam skaičiui *n* vienetu banginė funkcija aprašanti dalelės judėjimą duobėje, įgyja vieną papildomą mazgą.

4. Kvantinio osciliatoriaus kompiuterinis modeliavimas

Šis kvantmechaninis uždavinys apie kvantinį osciliatorių suvedamas į uždavinį apie dalelės judėjimą kvantinėje duobėje, kurios pavidalas formuojamas parabolinio tipo potencine funkcija. Nagrinėjant šį uždavinį svarbu nustatyti šios sistemos bangines funkcijas ir energijos spektrą bei atlikti kvantinio osciliatoriaus būsenų vizualizaciją pasinaudojant kompiuterine matematine sistema „*Mathcad 14 Professional*“.

Teorinėje dalyje išnagrinėta kvantinio osciliatoriaus sistema buvo vienmatė: ji tegalėjo judėti tik viena erdvine kryptimi, tačiau pasaulis yra trimatis todėl reikia spręsti trimačius uždavinius. Šiuo atveju nagrinėsime trimatį izotropinį kvantinį osciliatorių, kurio savybės visomis kryptimis yra vienodos.

Skaičiavimuose naudojama atominė vienetų sistema (av), kurioje trys fundamentalios pastoviosios konstantos, elektrono masė ir krūvis bei Planko redukuotoji konstanta, prilyginamos vienetui: $m = \hbar = e = 1$. Šioje sistemoje ilgio vienetas yra Boro spindulys (0,0529 nm), o energijos — dviguba vandenilio atomo jonizacijos energija (27,21 eV). Nagrinėjamų dydžių matavimo vienetų atominėje vienetų sistemoje (Fluge, 1971) ir SI sistemoje, ryšys pateikiamas 1 lentelėje:

1 lentelė. Atominė vienetų sistema.

Dydis	Atominė vienetų sistema	Simbolinis žymėjimas	Formulė	SI sistema
Masės vienetas	1 u[masė] =	1 u	m	$m = 9.10953\ 10^{-31}$ kg
Ilgio vienetas:	1 Boras =	1 a_0	$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$	$r_B = 0{,}529\ 10^{-10}$ m = 0.0528446 nm
Laiko vienetas:	1 u[laiko] =	1 u	$t = \frac{\hbar^3}{me^4}$	$t = 2.41220\ 10^{-17}$ s
Energijos vienetas:	1 Hartris =	1 E_h	$E = \frac{me^4}{\hbar^2}$	$E = 4.329\ 10^{-18}$ J=27.211 eV

4.1. Trimačio kvantinio osciliatoriaus banginė funkcija ir kvantiniai skaičiai

4.1.1. Trimatė Šredingerio lygtis

Įvairių kvantinių sistemų modeliuose naudojame tam tikro pavidalo potencinės energijos priklausomybės nuo koordinatės funkciją. Izotropinio kvantinio osciliatoriaus potencinės energijos funkciją trimatėje Dekarto koordinačių sistemoje yra:

$$U(x,y,z)=\frac{1}{2}kx^2+\frac{1}{2}ky^2+\frac{1}{2}kz^2, \tag{50}$$

čia $k_x=k_y=k_z=k$.

Kvantinio osciliatoriaus potencialas yra izotropinis, todėl jis yra vienodas visomis erdvės kryptimis. Mes įsivaizduojame, kad μ masės dalelė gali laisvai vibruoti ir suktis visomis kryptimis.

Užrašykime Hamiltoniano operatorių Dekarto koordinačių sistemoje:

$$\hat{H}(x,y,z)=\frac{p_x^2}{2\mu}+\frac{p_y^2}{2\mu}+\frac{p_z^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega x^2+\frac{1}{2}\mu\omega y^2+\frac{1}{2}\mu\omega z^2=$$
$$=\left(\frac{p_x^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega x^2\right)+\left(\frac{p_y^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega y^2\right)+\left(\frac{p_z^2}{2\mu}+\frac{1}{2}\mu\omega z^2\right)=\hat{H}_x(x)+\hat{H}_y(y)+\hat{H}_z(z). \tag{51}$$

Hamiltonianas yra užrašytas kaip trijų hamiltonianų suma, kiekviename apibrėžta viena koordinatė. Tikrinės funkcijos įgyja tokį pavidalą:

$$\psi_{n_xn_yn_z}(x,y,z)=\frac{1}{\sqrt{2^n n_x!\,n_y!\,n_z!}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2\left(x^2+y^2+z^2\right)}H_{n_x}(x)H_{n_y}(y)H_{n_z}(z)=$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2^n n_x!\,n_y!\,n_z!}}e^{-\frac{1}{2}\alpha^2r^2}H_{n_x}(x)H_{n_y}(y)H_{n_z}(z), \tag{52}$$

čia $H_{n_i}(x_i)$ yra Hermito polinomai, ir $\alpha=\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$.

Energijos tikrinių verčių išraiška:

$$E_{n_x n_y n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega = \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega = \\ = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \tag{53}$$

čia $n = n_x + n_y + n_z$

Pažymėtina, kad izotropinio osciliatoriaus nulinio taško energijos yra: $\frac{3}{2}\hbar\omega, \frac{1}{2}\hbar\omega$ kiekvienai koordinatei. Vienodų energetinių būsenų skaičius duotajam energetiniam lygmeniui yra lygus (n_x, n_y, n_z) galimų kombinacijų skaičiui, tai yra kvantinis skaičius n.

Nagrinėjant šį uždavinį Dekarto koordinačių sistemoje pažymėtina, kad jo sprendimas nedavė jokios informacijos apie kampinius momentus, todėl šį uždavinį sprendžiame sferinėje koordinačių sistemoje.

Sferiškai simetrinio kvantinio osciliatoriaus potencinės energijos funkcija yra:

$$U(r) = \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2, \tag{54}$$

čia r yra dalelės nuokrypis nuo pusiausvyros padėties, ω - kampinis dažnis, μ - dalelės masė.

Dalelės, kuri juda centriniame jėgų lauke, trimatė Šredingerio lygtis yra šitokia:

$$\nabla^2\psi + \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - U(r))\psi = 0, \tag{55}$$

μ yra dalelės masė, E – pilnutinė dalelės energija, $U(r)$ yra dalelės potencinė energija ($U(r)$ priklauso tik nuo sferinės koordinatės - polinio spindulio r), $\psi(r)$ - dalelės banginė funkcija, $\hbar$ - redukuotoji Planko konstanta.

Šią lygtį patogiausia spręsti naudojant sferines koordinates, nes tuomet kintamieji r, θ ir φ atsiskiria. Trijų argumentų banginę funkciją $\psi(r, \theta, \varphi)$ galima išreikšti radialiosios funkcijos $R(r)$ ir kampinės funkcijos $Y(\theta, \varphi)$ sandauga:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi), \tag{56}$$

čia $R(r)$ yra radialioji funkcija, o $Y(\theta, \varphi)$ -kampinė funkcija.

Pasirinkę sferinę koordinačių sistemą, galėsime pasinaudoti lauko simetrija. Laplaso operatorius ∇^2 sferinėmis koordinatėmis išreiškiamas šitaip:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\,sin^2\,\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\,\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\,sin^2\,\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \quad (57)$$

Sferinės koordinačių sistemos kintamųjų atskirimas trimatėje Šredingerio lygtyje leidžia gauti radialiąją Šredingerio lygtį:

$$\frac{d^2}{dr^2}R(r) + \frac{2m}{\hbar}\cdot\left[E - V(r) - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]\cdot R(r) = 0. \quad (58)$$

Izotropinio kvantinio osciliatoriaus atveju radialioji Šredingerio lygtis bus tokia:

$$\frac{d^2}{dr^2}R(r) + \frac{2m}{\hbar}\cdot\left[E - \frac{1}{2}\cdot r^2\cdot m\cdot\omega^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]\cdot R(r) = 0. \quad (59)$$

Nagrinėjant šią lygtį galima išskirti du atvejus, kai $\ell = 0$, tuomet ji tampa vienmačio osciliatoriaus lygtimi. Kai $\ell \neq 0$, tuomet centrinės jėgos atitolina dalelę nuo centro, kas priveda prie visiškai kito sprendimo.

Baigtinis šios lygties sprendinys yra $R(r)$ - radialioji banginė funkcija :

$$R(r) = C_r e^{-\frac{1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda}\cdot F_1\left(a,b,\lambda\cdot r^2\right) \quad (60)$$

čia C_r yra normalizavimo konstanta, $F_1\left(a,b,\lambda\cdot r^2\right)$ - hipergoemetrinė funkcija su parametrais a ir b. Šie parametrai lygus $a = \frac{3}{4} + \frac{\ell}{2} - \frac{k^2}{4\lambda}$, $b = \frac{3}{2} + \ell$ bei osciliatoriaus parametras $\lambda = \frac{m\omega}{\hbar}$.

Hipergeometrinės lygties sprendinys yra vadinamoji Kumerio funkcija (Burkhard, 2008), kuri apibrėžiama eilute. Kaip ir Hermito daugianarių atveju, ši eilutė nutrūksta ir Kumerio funkcija pavirsta n-tojo laipsnio daugianariu. Šio augimo galima išvengti tik tuomet, kai parametras a yra lygus radialiniam kvantiniam skaičiui su minuso ženklu ($a = -n_r$, kai $n_r = 0,1,2,\ldots$). Tai yra atvejas kuomet hipergeometrinė eilutė išsigimsta n_r daugianario laipsnyje.

Tai, turime kad parametras $a = \frac{3}{4} + \frac{\ell}{2} - \frac{k^2}{4\lambda} = -n_r$. Pasinaudodami išraiška $\frac{k^2}{2\lambda} = \frac{E}{\hbar\omega}$ gauname, kad energetiniai lygmenys bus lygus $E = \hbar\omega\left(2n_r + \ell + \frac{3}{2}\right)$, kai $n_r = 0,1,2,\ldots$.

Skaičių n_r vadiname radialiniu kvantiniu skaičiumi. Šiuo atveju energijos lygmenų sistema prasideda nuo nulinės energijos, kuri lygi $\frac{3}{2}\hbar\omega$. Energijos tikrinių verčių išraiška yra $E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega$, kuri yra identiška tikrinės energijos išraiškai gautai Dekarto koordinačių sistemoje.

4.1.2. Radialioji funkcija

Žinome, kad trijų argumentų banginę funkciją $\psi(r,\theta,\varphi)$ galima išreikšti radialiosios funkcijos $R(r)$ ir kampinės funkcijos $Y(\theta,\varphi)$sandauga:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)Y(\theta,\varphi), \tag{61}$$

čia $R(r)$ yra radialioji funkcija, o $Y(\theta,\varphi)$ -kampinė funkcija.

Bendruoju atveju izotropinio kvantinio osciliatoriaus normuota radialioji funkcija turi šitokį pavidalą

$$R_{n,\ell}(r) = N_{n\ell}\cdot r^{\ell}\cdot e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 r^2}\cdot L^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}_{\frac{1}{2}(n-\ell)}\left(\alpha^2 r^2\right), \tag{62}$$

čia $L^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}_{\frac{1}{2}(n-\ell)}\left(\alpha^2 r^2\right)$ yra jungtiniai Lagero polinomai; $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, kai pagrindinis kvantinis skaičius n=1, 2, 3 ... ir orbitinis kvantinis skaičius $\ell = 0,1,...,n-1.$

Normavimo daugiklis

$$N_{n\ell} = \left[\frac{2^{n+\ell+2}\cdot\alpha^{2\left(\ell+3/2\right)}}{\pi^{\frac{1}{2}}}\right]^{\frac{1}{2}}\cdot\left[\frac{\left[\frac{1}{2}(n-\ell)\right]!\left[\frac{1}{2}(n+\ell)\right]!}{(n+\ell+1)!}\right]^{\frac{1}{2}}. \tag{63}$$

Funkcija $L^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}_{\frac{1}{2}(n-\ell)}\left(\alpha^2 r^2\right)$ yra jungtiniai Lagero polinomai, kurių išraiškos susietos su kvantiniais skaičiais pateiktos 2 lentelėje:

2 lentelė. Jungtiniai Lagero polinimai.

n	ℓ	$L_{\frac{1}{2}(n-\ell)}^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}\left(\alpha^2 r^2\right),\ z=\alpha^2 r^2$
0	0	$L_0^{1/2}(z)=1$
1	1	$L_0^{3/2}(z)=1$
2	0	$L_0^{1/2}(z)=-z+\frac{3}{2}$
	2	$L_0^{3/2}(z)=1$
3	1	$L_1^{3/2}(z)=-z+\frac{5}{2}$
	3	$L_0^{7/2}(z)=1$
4	0	$L_0^{1/2}(z)=\frac{1}{2}z^2+\frac{5}{2}z+\frac{15}{8}$
	2	$L_0^{1/2}(z)=-z+\frac{7}{2}$
	4	$L_0^{9/2}(z)=1$

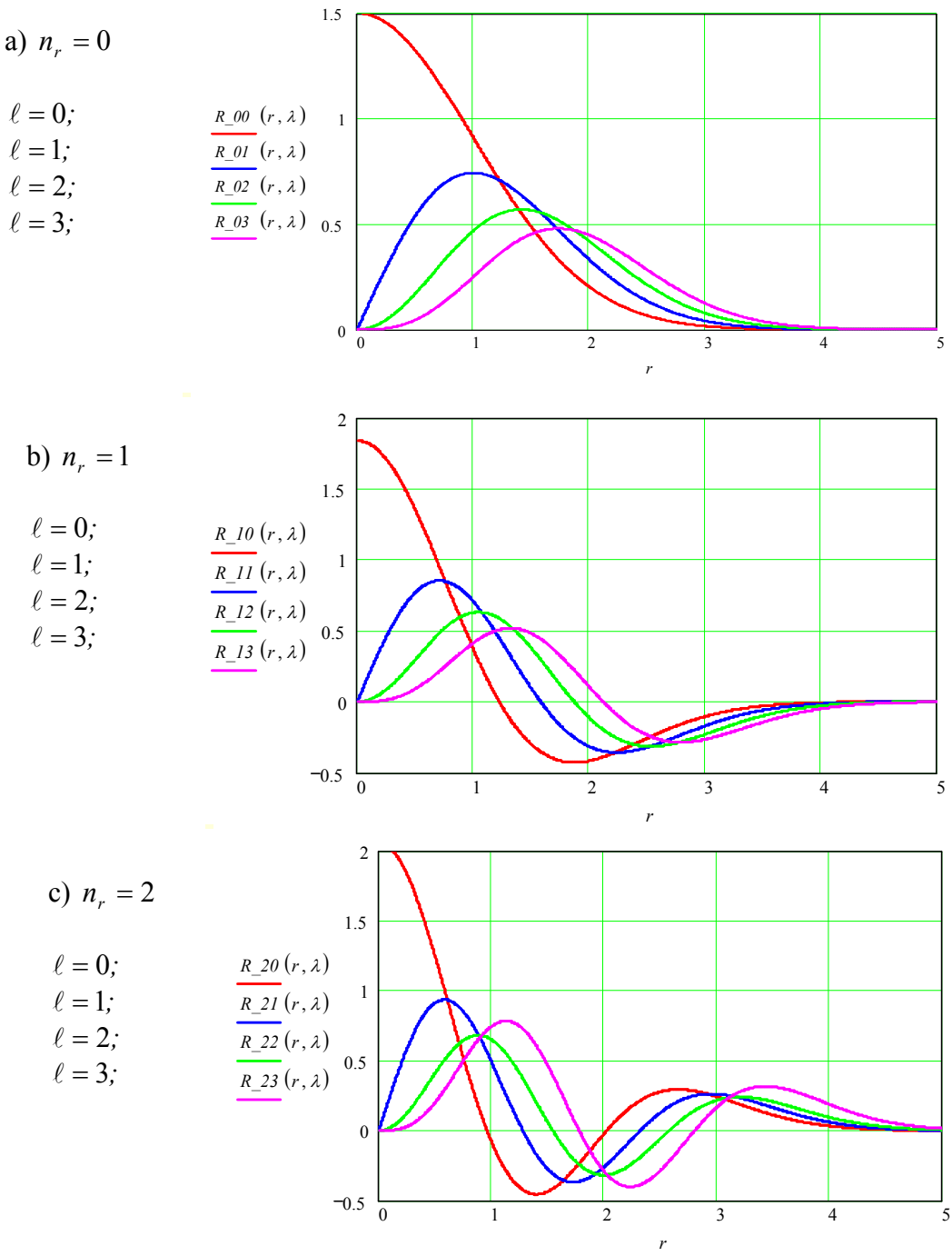
Pasinaudodami kompiuterine matematine sistema „*Mathcad 14 Professional*“ gauname radialiosios funkcijos algebrines išraiškas sferinėje koordinačių sistemoje, kurios pateiktos 3 lentelėje. Šiuo atveju radialinė funkcija susieta su šiais parametrais, t. y. radialiniu kvantiniu skaičiumi $n_r = 0,1,2,3\ldots$ ir orbitiniu kvantiniu skaičiumi $\ell = 0,1,2,3\ldots$. Šiuose algebrinėse išraiškose ji priklauso nuo taško atstumo iki koordinačių pradžios, t. y. polinio spindulio r ir osciliatoriaus parametro $\lambda = \frac{m\omega}{\hbar}$ (Burkhardt, 2008).

3 lentelė. Radialiosios funkcijos algebrinės išraiškos sferinėse koordinatėse.

nr=n-ℓ-1	ℓ	Radialioji banginė funkcija R_nrℓ(r,λ)
0	0	$R_00(r,\lambda) := 2\cdot\lambda\cdot\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\exp\left(\frac{-1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda\right)$
	1	$R_01(r,\lambda) := 2\cdot\sqrt{\frac{2}{3}}\cdot\lambda^2\cdot\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\exp\left(\frac{-1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda\right)\cdot r$
	2	$R_02(r,\lambda) := \frac{4}{\sqrt{15}}\cdot\lambda^3\cdot\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\exp\left(\frac{-1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda\right)\cdot r^2$
	3	$R_03(r,\lambda) := 4\cdot\sqrt{\frac{2}{105}}\cdot\lambda^4\cdot\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\exp\left(\frac{-1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda\right)\cdot r^3$
1	0	$R_10(r,\lambda) := \sqrt{6}\cdot\lambda\cdot\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\exp\left(\frac{-1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda\right)\cdot\left(1-\frac{2}{3}\cdot r^2\cdot\lambda\right)$
	1	$R_11(r,\lambda) := \frac{2}{\sqrt{15}}\cdot\lambda^2\cdot\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\exp\left(\frac{-1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda\right)\cdot r\cdot\left(5-2\cdot r^2\cdot\lambda\right)$
	2	$R_12(r,\lambda) := 2\cdot\sqrt{\frac{2}{105}}\cdot\lambda^3\cdot\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\exp\left(\frac{-1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda\right)\cdot r^2\cdot\left(7-2\cdot r^2\cdot\lambda\right)$
	3	$R_13(r,\lambda) := \frac{4}{9}\cdot\sqrt{\frac{3}{35}}\cdot\lambda^4\cdot\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\exp\left(\frac{-1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda\right)\cdot r^3\cdot\left(9-2\cdot r^2\cdot\lambda\right)$
2	0	$R_20(r,\lambda) := \frac{1}{\sqrt{30}}\cdot\lambda\cdot\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\exp\left(\frac{-1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda\right)\cdot\left[15+4\cdot r^2\cdot\lambda\cdot\left(-5+r^2\cdot\lambda\right)\right]$
	1	$R_21(r,\lambda) := \frac{1}{\sqrt{105}}\cdot\lambda^2\cdot\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\exp\left(\frac{-1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda\right)\cdot r\cdot\left[35+4\cdot r^2\cdot\lambda\cdot\left(-7+r^2\cdot\lambda\right)\right]$
	2	$R_22(r,\lambda) := \frac{1}{3}\cdot\sqrt{\frac{2}{105}}\cdot\lambda^3\cdot\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\exp\left(\frac{-1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda\right)\cdot r^2\cdot\left[63+4\cdot r^2\cdot\lambda\cdot\left(-9+r^2\cdot\lambda\right)\right]$
	3	$R_23(r,\lambda) := \frac{2}{3}\cdot\sqrt{\frac{2}{1155}}\cdot\lambda^4\cdot\sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot\exp\left(\frac{-1}{2}\cdot r^2\cdot\lambda\right)\cdot r^3\cdot\left[99+4\cdot r^2\cdot\lambda\cdot\left(-11+r^2\cdot\lambda\right)\right]$

Radialiosios funkcijos algebrinės išraiškos yra gana sudėtingos ir sunku pastebėti priklausomybes nuo atitinkamų kvantinių skaičių, tai galime atlikti pasinaudoję grafine šių funkcijų vizualizacija.

Atlikdami analizę pateikiame trimačio kvantinio osciliatoriaus radialiosios funkcijos grafikus naudojant kompiuterine matematine sistema „*Mathcad 14 Professional*". Šių funkcijų grafinė priklausomybė nuo polinės koordinatės r pateikiama prie skirtingų radialinio kvantinio skaičiaus reikšmių $n_r = 0,1,2$ ir šių orbitinio kvantinio skaičiaus verčių $\ell = 0,1,2,3$.

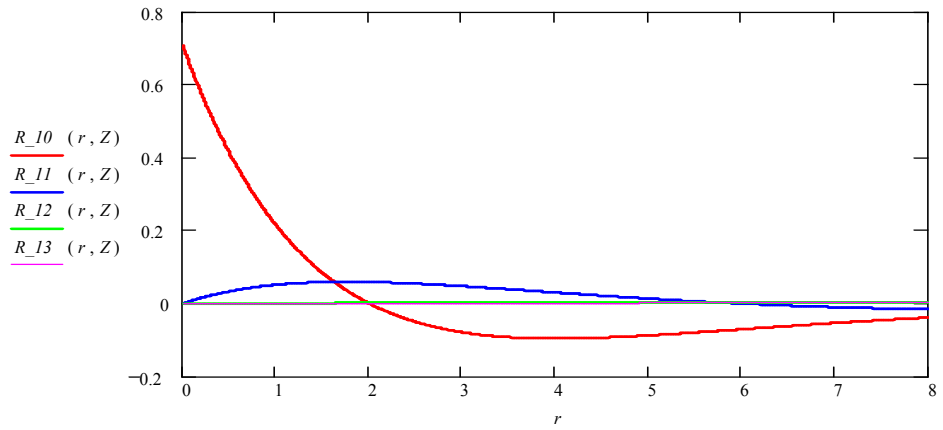


13 pav. Radialiosios funkcijos priklausomybės nuo atstumo r kreivės

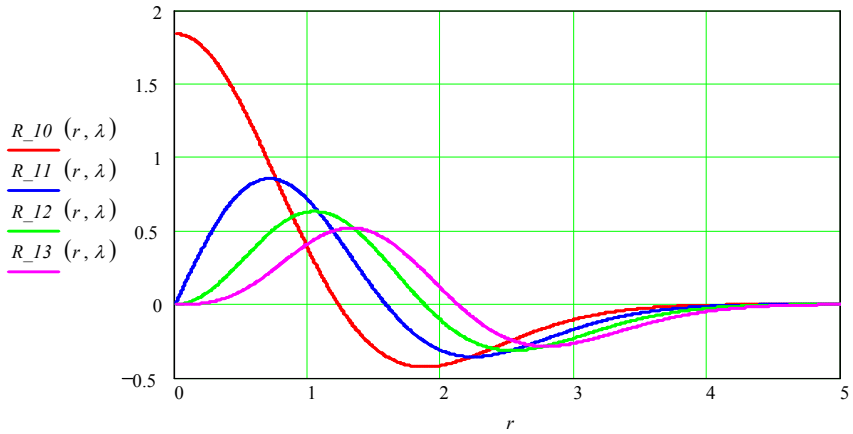
Analizuojant šiuos grafikus galime pastebėti, kad kai orbitinis kvantinis skaičius yra lygus nuliui $\ell = 0$ radialiosios funkcijos visais atvejais, nepriklausomai nuo radialinio kvantinio skaičiaus reikšmės ir koordinačių pradžioje yra nelygios nuliui. Šiame taške pasiekia maksimalią vertę. O kai $\ell \neq 0$ šios funkcijos koordinačių pradžioje yra lygios nuliui ir jų didėjimo pobūdį išreiškia parabolė. Funkcijos posvyris nulio aplinkoje turimajam orbitiniam kvantiniam skaičiui ℓ darosi vis statesnis, kai radialinis kvantinis skaičius n_r didėja.

Taškai, kuriuose radialioji funkcija tampa lygi nuliui vadiname *mazgais*. Radialiosios dalies mazgų skaičius r kitimo srityje yra lygus radialiniam kvantiniam skaičiui $n_r = n - \ell - 1$. Iš 13 pav. matome, kad kai $n_r = 0$ radialioji funkcija mazgų neturi, o $n_r = 1$ funkcija turi vieną mazgą ir t.t.

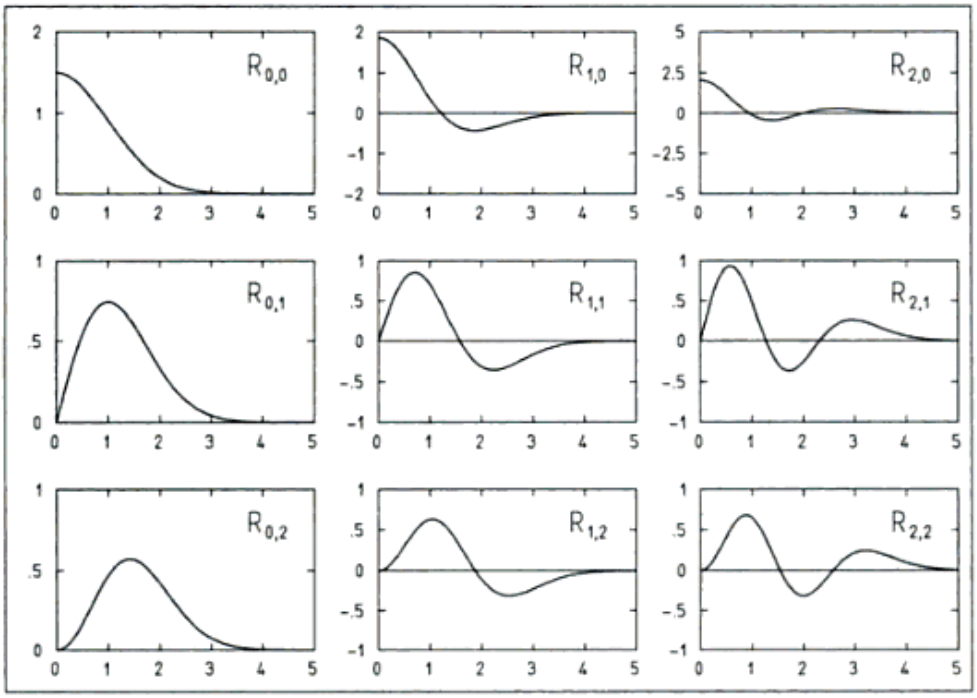
Kvantinio osciliatoriaus potencialas $U(r) = \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ visą laiką didėja kvadratiškai (15 pav.), todėl radialiosios funkcijos nuslopsta sparčiau negu kuloninio potencialo $U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}$ atveju. Nagrinėjant vandeniliškasias sistemas $Z = 1$, iš 14 paveikslo matome, kad kai r didėja šios funkcijos artėja prie nulio.



14 pav. Vandenilio atomo radialiosios funkcijos priklausomybės nuo r kreivės , kai būsenų radialinis kvantinis skaičius $n_r = 1$, o orbitinis kvantinis skaičius $\ell = 0, 1, 2, 3$.

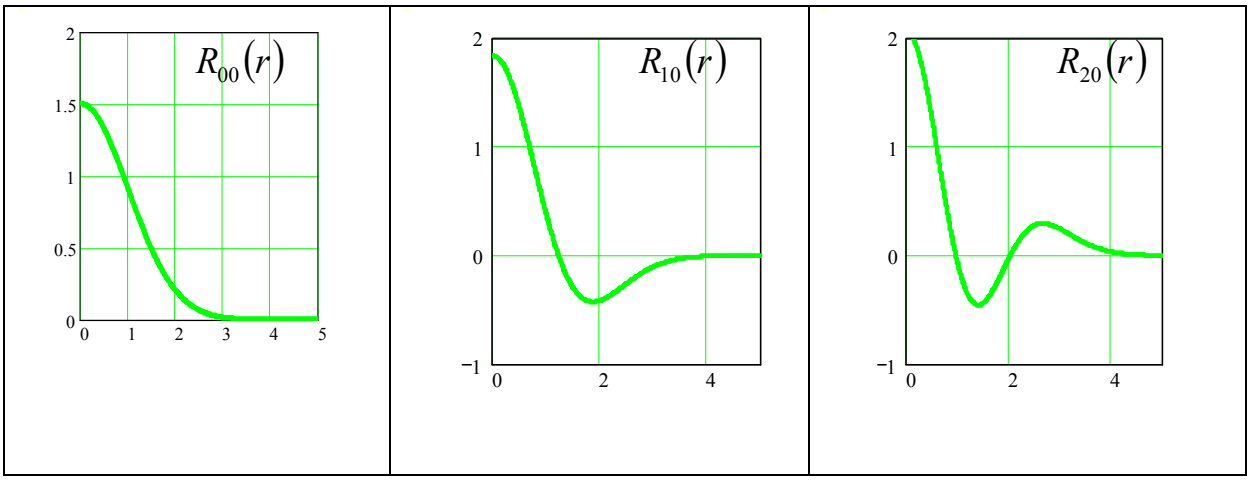


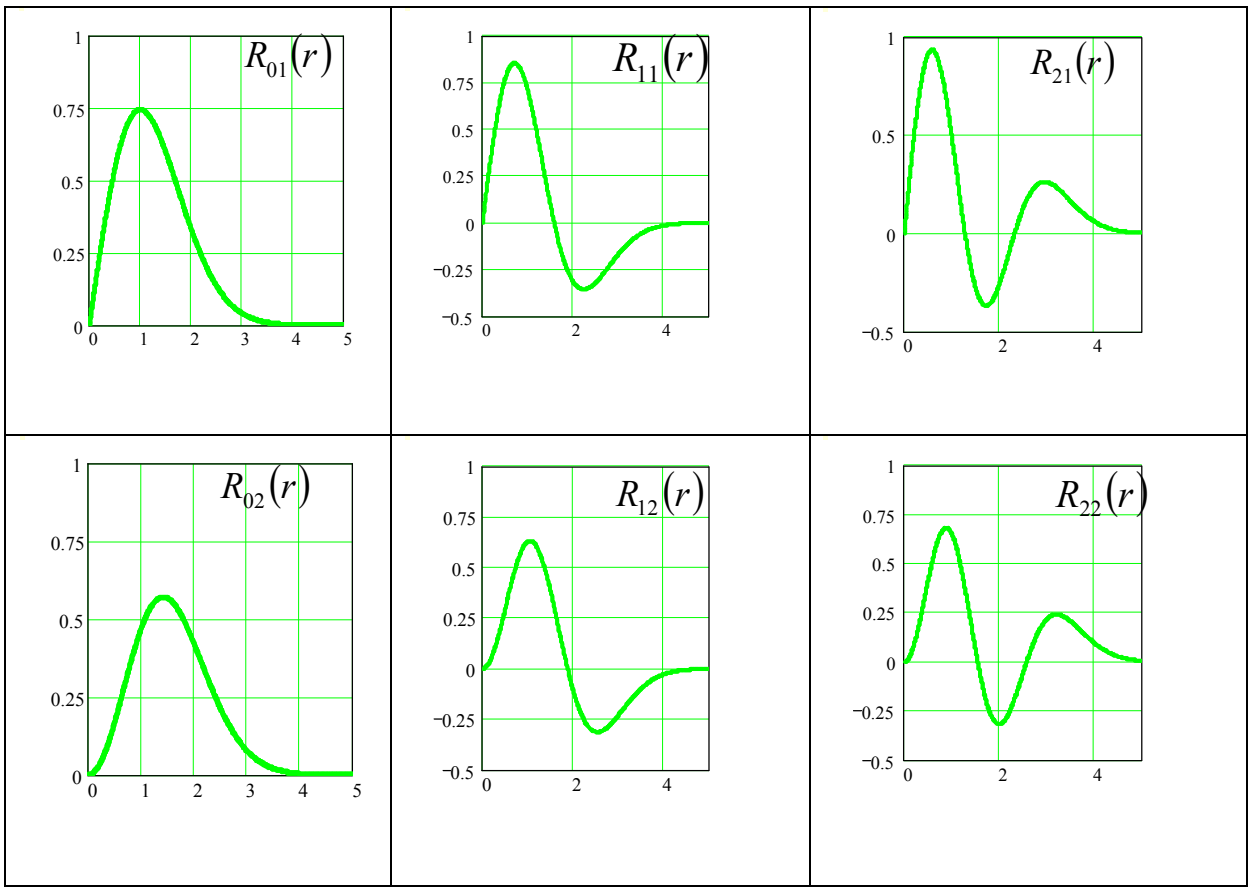
15 pav. Kvantinio osciliatoriaus radialiosios funkcijos priklausomybės nuo atstumo r kreivės.Būsenų radialinis kvantinis skaičius $n_r = 1$, o orbitinis kvantinis skaičius $\ell = 0, 1, 2, 3$.



16 pav. Teorinės trimačio kvantinio osciliatoriaus tikrinės radialiosios funkcijos $R_{nr,\ell}(r)$ pateiktos Siegmund Brandt, Hans Dieter Dahmen knygoje (Brandt, 1993)

Šiuose radialinių funkcijų $R_{nr,\ell}(r)$ kreivėse matome, kad kiekvieno stulpelio kreivės atitinka tą pačią radialinio kvantinio skaičiaus n_r vertę, o kiekvienos eilutės kreivės – tą pačią orbitinio kvantinio skaičiaus ℓ vertę.



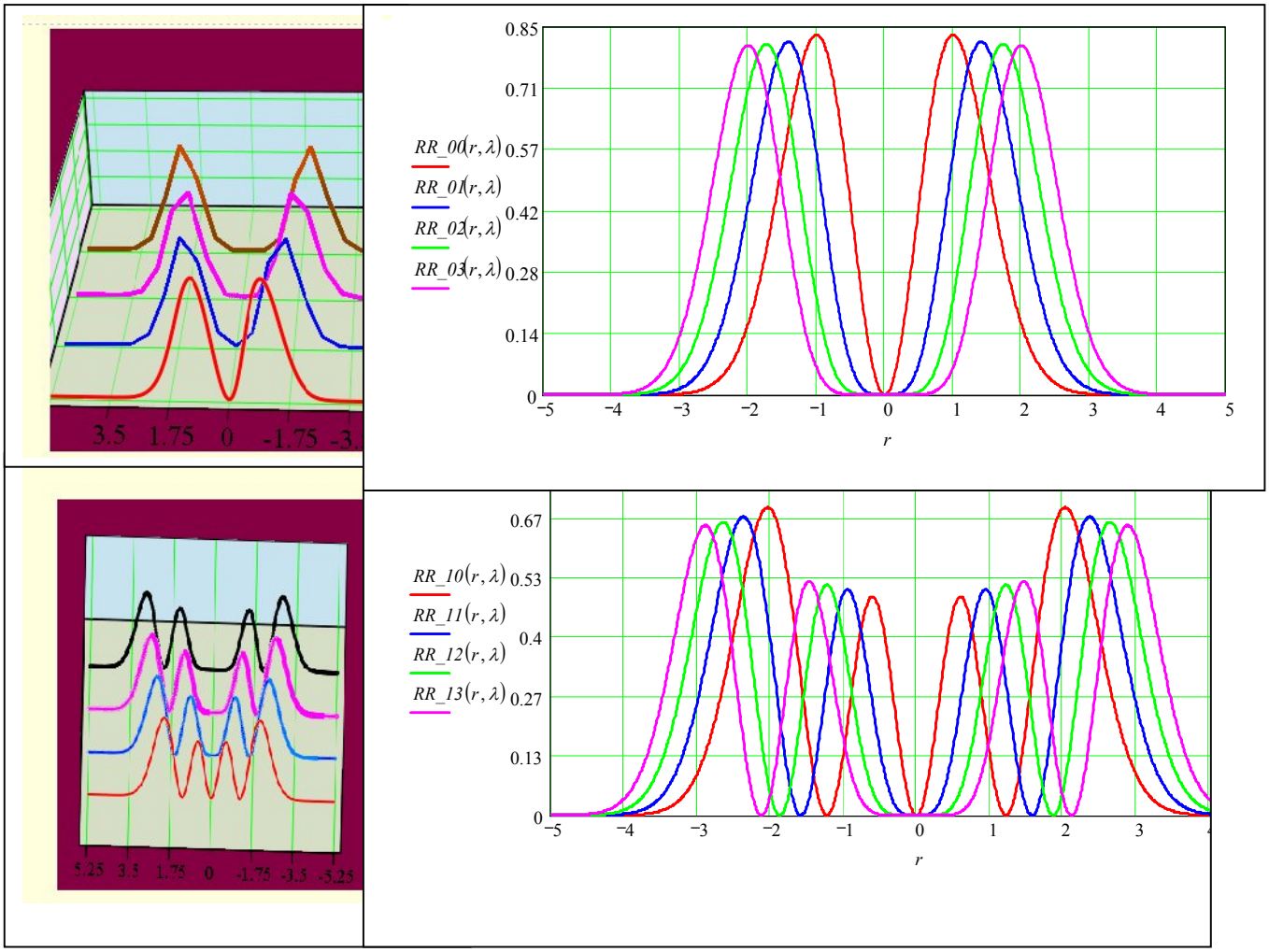


17 pav. Trimačio kvantinio osciliatoriaus tikrinės radialiosios funkcijos $R_{nr,\ell}(r)$ kreivės

Lyginant radialinių funkcijų kreives sferinėje koordinačių sistemoje pateiktas Siegmund Brandt, Hans Dieter Dahmen, The picture book of quantum mechanics, (Brandt, 1993) knygoje (16 pav.) su šių būsenų kreivėmis gautomis naudojant kompiuterine matematine sistema „*Mathcad 14 Professional*" (17 pav.) matome, kad jos yra identiškos.

Dydis, kuris apibūdina dalelės buvimo duotajame erdvės taške tikimybę, vadinamas **tikimybės tankiu**. **Tikimybės tankis** – dalelės radimo duotojoje nykstamai mažoje erdvės srityje tikimybės dP ir tos srities tūrio dV santykis $\frac{dP}{dV}$.

Priminkime, kad jei funkcija išreikšta Dekarto koordinačių sistemoje, tai funkcijos modulio kvadratas $|\Psi(x, y, z)|^2$ *duoda tikimybės tankį aptikti dalelę taške (x,y,z).* Sferinėse koordinačių sistemoje funkcija $|R_{n\ell}(r)|^2$ - duoda tikimybę aptikti dalelę vienetiniame tūrio elemente, o funkcija $|rR_{n\ell}(r)|^2 dr$ apibrėžia tikimybę rasti dalelę sferiniame sluoksnyje, kurio spindulys r ir dr - sluoksnio storis. Ši funkcija vadinama *radialiniu tikimybės tankiu*.

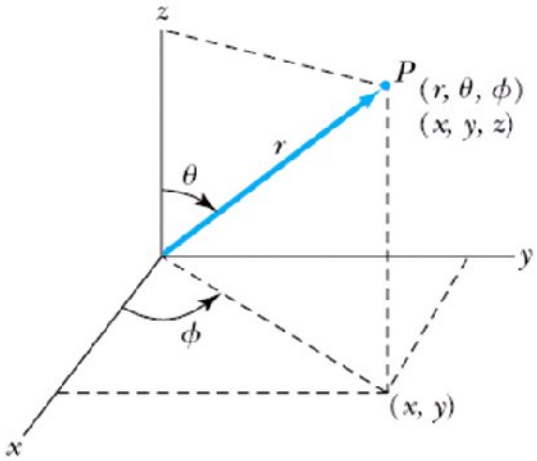


18 pav. Radialinis tikimybės tankis

Matome, kad didesnė tikimybė dalelę aptikti yra arti intervalo galų negu intervalo centre, nes čia tikimybės tankis yra lygi nuliui. Didėjant radialiniam kvantiniam skaičiui būsenų užpildymo funkcijos tikimybinė išraiška vis labiau spaudžiama ties potencinės duobės kraštų. Tai didelių energijų svyravimus padaro vis daugiau panašius į klasikinio osciliatoriaus, nes šios padėtys atitinka osciliojančios švytuoklėss posūkio taškus, kuriuose greitis lygus nuliui ir klasikinė dalelė ilgiausiai randasi.

4.1.3 Sferinė harmonika (kampinė funkcija)

Kvantinėje mechanikoje dažnai vietoje Dekarto koordinačių x, y, z naudojame sferines (erdvines polines) koordinates r, θ, φ. Polinė koordinatė r (polinis spindulys) yra taško atstumas nuo koordinačių pradžios, θ - polinis kampas, o φ - azimutas.



19 pav. Sferinė koordinačių sistema

Sferines koordinates ir Dekarto koordinates sieja formulės:

$$x = r\sin\theta\cos\varphi,$$

$$y = r\sin\theta\sin\varphi,$$

$$z = r\cos\theta.$$

(64)

Atliekant tokią uždavinio transformaciją Šredingerio lygtis susiskaido į dvi nepriklausomas dalis. Viena dalis – kontroliuojama radialinės koordinatės ir priklauso nuo sąveikos potencialo, antra yra nepriklausoma „kampinė“ dalis (sferinė harmonika). Sferinės harmonikos turi didelę svarbą, nes pagal jų simetriją yra atliekama kvazidalelių orbitalių ir energetinių būsenų klasifikacija.

Laplaso operatorius sferinėse koordinatėse yra šitoks:

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}r - \frac{1}{r^2}\frac{1}{\hbar^2}\hat{L}^2. \qquad (65)$$

Čia atsiranda $\hat{L}$ - judesio kiekio momento operatorius, kurio tikrinės funkcijos yra taip vadinamos sferinės harmonikos $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$, tenkinančios judesio kiekio momento operatoriaus $\hat{L}^2$ bei jo projekcijos $\hat{L}_z$ tikrinių verčių lygtims:

$$\hat{L}^2 Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \hbar^2\ell(\ell+1)Y_{\ell m}(\theta,\varphi),$$
$$\hat{L}Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta,\varphi).$$

Sferines harmonikas $Y_{lm}(\theta,\phi)$ galima reikšti Ležandro daugianariais (Buika, 2010):

$$P_l(u) = \frac{1}{2^l l!}\frac{d^l}{du^l}\left[\left(u^2-1\right)^l\right], \qquad (66)$$

Ležandro daugianaris yra bendresniųjų Ležandro funkcijų $P_l^m(u)$ atskiras atvejis. Jos išreiškiamos šitaip:

$$P_l^m(u) = (1-u^2)^{m/2} \frac{d^m}{du^m} P_l(u),\ m = 0,\ 1,\ 2,\ 3...,\ell. \qquad (67)$$

Šioje formulėje m ir ℓ yra kvantiniai skaičiai. Jei magnetinis kvantinis skaičius $m > 0$, sferinės harmonikos $Y_{lm}(\theta,\phi)$ reiškiamos šitaip:

$$Y_{l,m}(\theta,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}, \qquad (68)$$

o kai $m < 0$, sferinės harmonikos reiškiamos:

$$Y_{l,-m}(\theta,\varphi) = (-1)^m Y_{l.m}^*(\theta,\varphi). \qquad (69)$$

Nors Ležandro polinomai $P_l\ (u)$ ir jungtinis Ležandro daugianariais $P_l^m(u)$ yra realios argumento u funkcijos. Sferinės harmonikos yra kompleksinės θ ir φ funkcijos, o fizikinę prasmę – tikimybę aptikti dalelę (θ,φ) kryptimi – turi jų modulių kvadratai: $\left|Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\right|^2 = Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\cdot Y_{\ell m}^*(\theta,\varphi)$, kurie priklauso tik nuo θ kampo, t.y. turi z ašinę simetriją.

Aprašant sferines harmonikas naudojame šias išraiškas kompiuterinėje matematinėje sistemoje „*Mathcad 14 Proffessional*“:

$$P(x,l,m) := if\left[l = 0,1, \frac{1}{2^l\, l!}\cdot\left(1-x^2\right)^{\frac{m}{2}}\cdot\left[\frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}}\left(x^2-1\right)^l\right]\right]$$

$$Y(\theta,\phi,l,m) := \sqrt{\frac{2\cdot l+1}{4\cdot\pi}\cdot\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}\cdot P\left(cos(\theta),l,m\right)\cdot e^{i\cdot m\cdot\phi}$$

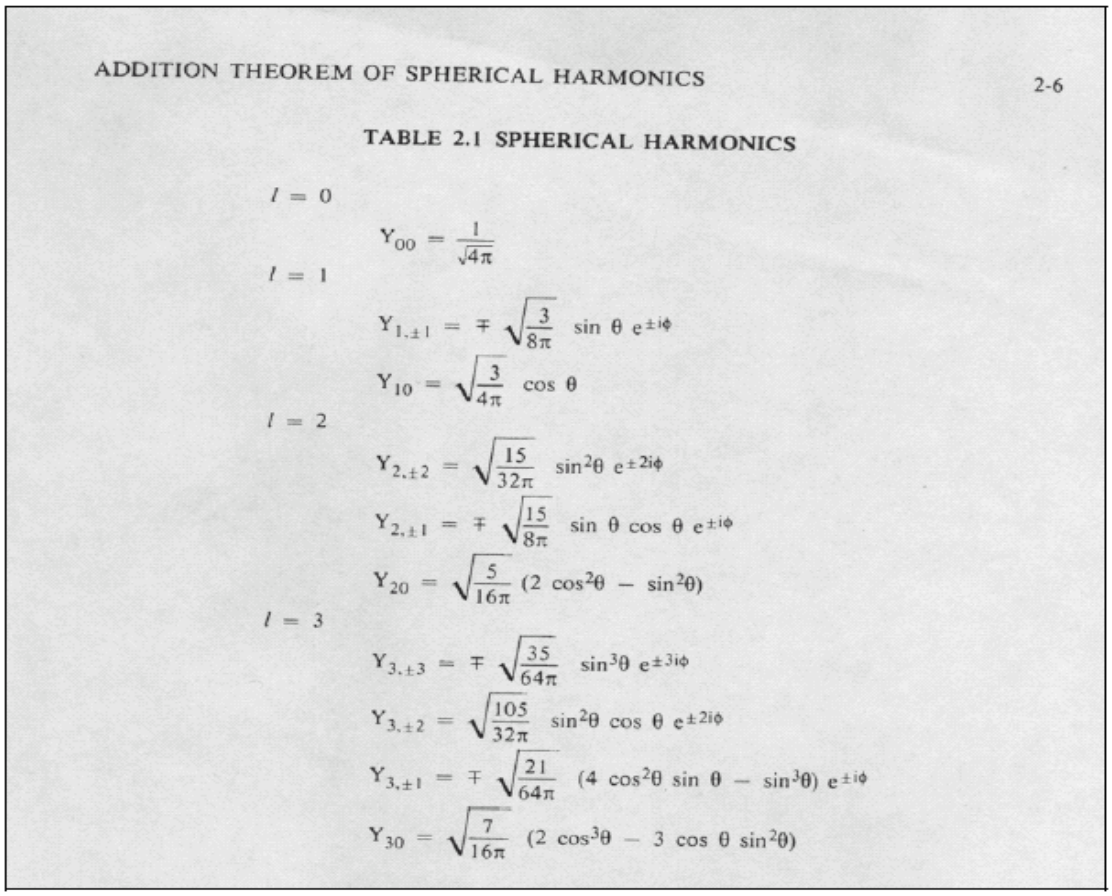
Čia $P(x,\ l,\ m)$ yra jungtinis Ležandro daugianaris, $Y(\theta,\phi,\ell,m)$ - kampinė funkcija (sferinė harmonika).

Kelios mažiausias orbitinio kvantinio skaičiaus vertes atitinkančių sferinių harmonikų išraiškos pateiktos 4 lentelėje.

4 lentelė. Sferinės harmonikos $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ algebrinės išraiškos.

ℓ	m	Sferinė harmonikos $Y\ell m(\theta,\varphi)$
0	0	$Y_00(\theta,\phi) := \frac{1}{2\cdot\sqrt{\pi}}$
1	0	$Y_10(\theta,\phi) := \frac{\sqrt{3}}{2\cdot\sqrt{\pi}}\cdot cos(\theta)$
1	1	$Y_11(\theta,\phi) := \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8\cdot\pi}}\cdot sin(\theta)\cdot exp(i\cdot\phi)$
2	0	$Y_20(\theta,\phi) := \frac{\sqrt{5}}{4\cdot\sqrt{\pi}}\cdot(3\cdot cos(\theta)^2 - 1)$
2	1	$Y_21(\theta,\phi) := \frac{\sqrt{30}}{4\cdot\sqrt{\pi}}\cdot sin(\theta)\cdot cos(\theta)\cdot exp(i\cdot\phi)$
2	2	$Y_22(\theta,\phi) := \frac{\sqrt{30}}{8\cdot\sqrt{\pi}}\cdot sin(\theta)^2\cdot exp(2\cdot i\cdot\phi)$

5 lentelė. Sferinių funkcijų reikšmės pateiktos Robert D. Cowan knygoje. (Cowan, 1997).



ADDITION THEOREM OF SPHERICAL HARMONICS 2-6

TABLE 2.1 SPHERICAL HARMONICS

$l = 0$

$$Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

$l = 1$

$$Y_{1,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\ \sin\theta\ e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\ \cos\theta$$

$l = 2$

$$Y_{2,\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\ \sin^2\theta\ e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\ \sin\theta\cos\theta\ e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{20} = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\ (2\cos^2\theta - \sin^2\theta)$$

$l = 3$

$$Y_{3,\pm3} = \mp\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\ \sin^3\theta\ e^{\pm 3i\phi}$$

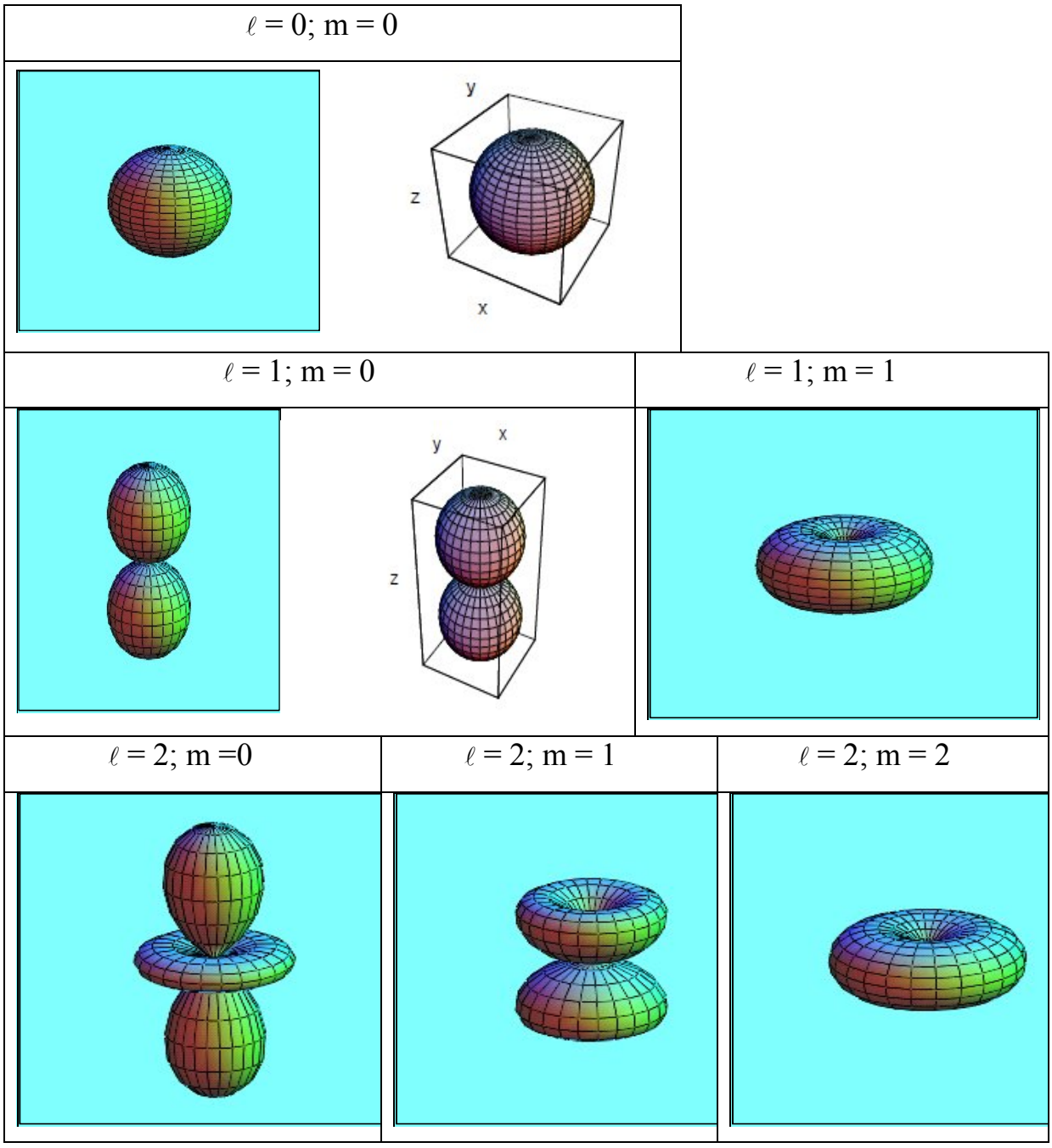
$$Y_{3,\pm2} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}}\ \sin^2\theta\cos\theta\ e^{\pm 2i\phi}$$

$$Y_{3,\pm1} = \mp\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\ (4\cos^2\theta\sin\theta - \sin^3\theta)\ e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{30} = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}\ (2\cos^3\theta - 3\cos\theta\sin^2\theta)$$

Lyginant duomenis pateiktus Robert D. Cowan knygoje (Cowan, 1997) su duomenimis gautais kompiuterine matematine sisitema Matchad matome, kad jie yra identiški.

Svarbu, kad būtų galima vizualizuoti šias funkcijas, nes jos nusako tikimybės tankio pasiskirstymą, t.y. sferinių harmonikų absoliutinių verčių kvadratų atvaizdai. Vienas iš vizualizavimo būdų sferinės harmonikos yra šias funkcijas vaizduoti sferinėje koordinačių erdvėje.



20 pav. Sferinių harmonikų absoliutinių verčių kvadratų atvaizdai sferinėje koordinačių sistemoje

Sferinės harmonikos priklauso nuo dviejų kampų, jas galime vaizduoti sferinėje koordinačių sistemoje. Šie atvaizdai yra pateikti 20 pav., kuriuose $|Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2$ yra lygus atstumui nuo koordinačių pradžios iki pavaizduoto paviršiaus kryptimi θ ir φ.

Sferinės harmonikos $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ užduoda kampinius pasiskirstymus aptikti sąveikaujančias daleles tarpusavio atstumu *r* tikimybės tankį. Iš 20 pav. matome, kad kai $\ell = 0$; m = 0, t. y. neišsigimusiose būsenose, yra stebima pilna sferinė simetrija, kai kitais $\ell \neq 0$ atvejais ji yra pažeidžiama.

Tokioje sistemoje, kai $\ell = 0$; m = 0, tai $|Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2 = \frac{1}{4\pi}$ yra sfera. Sferiškai simetriška "s" tipo funkcija visur yra teigiama, tuo tarpu trys "p" tipo orbitalės (p_x, p_y p_z) yra hantelio formos su teigiama ir neigiama dalimi. Jai būdinga cilindrinė simetrija z ašies atžvilgiu, tai funkcija nepriklauso nuo azimuto φ. Funkcija įgyja maksimalias vertes, kai $\theta = 0$ (išilgai z ašies) ir $\theta = \pi$ (išilgai -z ašies), tampa lygi nuliui $\theta = \frac{\pi}{2}$ (xy plokštumoje).

Visų galimų ℓ ir m verčių atveju funkcijos $|Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2$ yra simetriškos sukimosi apie z ašį atžvilgiu. Tam tikrų θ verčių funkcijos $|Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2$ lygios nuliui, o jeigu tos θ vertės nelygios nuliui arba π/2, jos vadinamos $|Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2$ mazgais. Vadinasi, sferinės harmonikos $|Y_{\ell\ell}(\theta,\varphi)|^2$ neturi mazgų , o $|Y_{\ell m}(\theta,\varphi)|^2$ turi ℓ-| m | mazgų.

Kvantinių skaičių trejetą n,ℓ,m atitinkanti banginė funkcija - tai sferinės harmonikos $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ ir radialiosios funkcijos $R_{nl}(r)$ sandauga. Tai kvantinio osciliatoriaus banginės funkcijos išraiška:

$$\Psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi)\,. \qquad (70)$$

Pilnutinė banginė funkcija yra radialiosios ir kampinės dalies sandauga, tai banginės funkcijos atvaizde, pastebimos šių abiejų funkcijų savybės. Kampinė dalis apibrėžia pasiskirstymą ir ženklą erdvėje, o radialioji dalis nusako banginės funkcijos amplitudę ir ženklo kitimą.

6 lentelė. Banginių funkcijų algebrinės išraiškos sferinėje koordinačių sistemoje.

ℓ	m	Banginė funkcija $\Psi_n\ell m(r,\theta,\varphi,\lambda)$
0	0	$\psi_000(r,\theta,\phi,\lambda) \to \frac{\lambda \cdot e^{-\frac{\lambda \cdot r^2}{2}} \cdot \sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}}{\sqrt{\pi}}$
1	0	$\psi_010(r,\theta,\phi,\lambda) \to \frac{\sqrt{2} \cdot \lambda^2 \cdot r \cdot e^{-\frac{\lambda \cdot r^2}{2}} \cdot \cos(\theta) \cdot \sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}}{\sqrt{\pi}}$
1	1	$\psi_011(r,\theta,\phi,\lambda) \to \frac{\lambda^2 \cdot r \cdot e^{\phi \cdot i} \cdot e^{-\frac{\lambda \cdot r^2}{2}} \cdot \sin(\theta) \cdot \sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}}{\sqrt{\pi}}$
2	0	$\psi_020(r,\theta,\phi,\lambda) \to \frac{\sqrt{5}\sqrt{15} \cdot \lambda^3 \cdot r^2 \cdot e^{-\frac{\lambda \cdot r^2}{2}} \cdot \sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}} \cdot \left(3 \cdot \cos(\theta)^2 - 1\right)}{15\sqrt{\pi}}$
2	1	$\psi_021(r,\theta,\phi,\lambda) \to \frac{\sqrt{15}\sqrt{30} \cdot \lambda^3 \cdot r^2 \cdot e^{\phi \cdot i} \cdot e^{-\frac{\lambda \cdot r^2}{2}} \cdot \cos(\theta) \cdot \sin(\theta) \cdot \sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}}{15\sqrt{\pi}}$
2	2	$\psi_022(r,\theta,\phi,\lambda) \to \frac{\sqrt{15} \cdot \sqrt{30} \cdot \lambda^3 \cdot r^2 \cdot e^{2i \cdot \phi} \cdot e^{-\frac{\lambda \cdot r^2}{2}} \cdot \sin(\theta)^2 \cdot \sqrt[4]{\frac{\lambda}{\pi}}}{30\sqrt{\pi}}$

Kaip matome šių funkcijų išraiškos bendruoju atveju yra gana sudėtingo pavidalo. Šiuose išraiškose λ - osciliatoriaus parametras. Paprasčiausios yra "s" tipo funkcija , kai $\ell = 0$; m = 0, nes jų kampinė funkcija $Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$ yra lygi konstantai $1/2\sqrt{\pi}$. Šios banginės yra sferiškai simetrinės. Banginės funkcijos, kurios atitinka būsenas kai $\ell > 0$ nėra sferiškai simetrinės.

4.2 Trimačio kvantinio osciliatoriaus būsenų vizualizacija

Banginės funkcijos algebrines išraiškas galime gauti ne tik sferinėje koordinačių sistemoje, bet ir Dekarto koordinačių sistemoje. Tuomet ji $\Psi(x,y,z,\lambda)$ priklauso nuo koordinačių x, y ir z bei osciliatoriaus parametro λ.

Žinome, kad kvantinio osciliatoriaus būseną aprašanti banginė funkcija $\Psi(x,y,z,\lambda)$ neturi prasmės, o fizikinę prasmę nusako jos tikimybės tankis. Tam kad sukurti banginės funkcijos grafikus mums reikia atlikti transformaciją – sferines poliarines koordinates transformuoti į Dekarto koordinates.

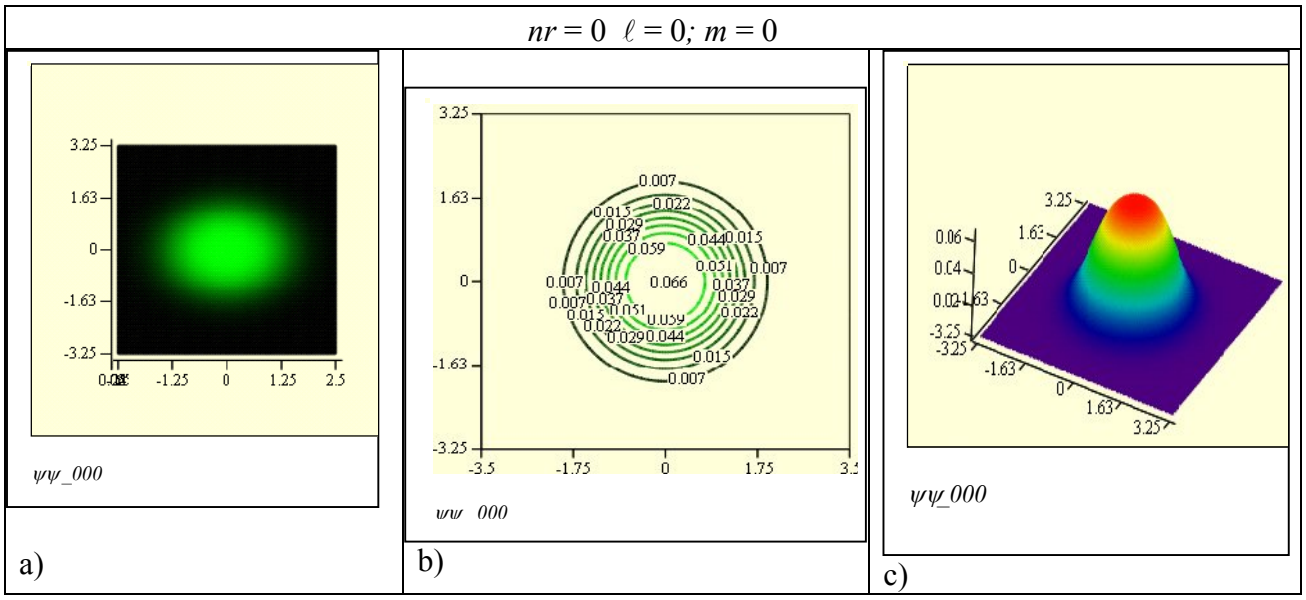
7 lentelė. Banginių funkcijų tikimybės tankių algebrinės išraiškos Dekarto koordinačių sistemoje

ℓ	m	Banginė funkcija $\Psi_n\ell m(r,\theta,\varphi,\lambda)$
0	0	$\Psi\Psi_000(x,y,z,\lambda) := \frac{1}{\pi}\cdot\lambda^2\cdot\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot exp\left[-\lambda\cdot\left(x^2+y^2+z^2\right)\right]\cdot\left(x^2+y^2+z^2\right)$
1	0	$\Psi\Psi_010(x,y,z,\lambda) := \frac{2}{\pi}\cdot\lambda^4\cdot\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot exp\left[-\lambda\cdot\left(x^2+y^2+z^2\right)\right]\cdot\left(x^2+y^2+z^2\right)\cdot z^2$
1	1	$\Psi\Psi_011(x,y,z,\lambda) := \frac{1}{\pi}\cdot\lambda^4\cdot\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot exp\left[-\lambda\cdot\left(x^2+y^2+z^2\right)\right]\cdot\left(x^2+y^2+z^2\right)\cdot\left(x^2+y^2\right)$
2	0	$\Psi\Psi_020(x,y,z,\lambda) := \frac{1}{3\cdot\pi}\cdot\lambda^6\cdot\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot exp\left[-\lambda\cdot\left(x^2+y^2+z^2\right)\right]\cdot\left(x^2+y^2+z^2\right)^3\cdot\left(3\frac{z^2}{x^2+y^2+z^2}-1\right)^2$
2	1	$\Psi\Psi_021(x,y,z,\lambda) := \frac{2}{\pi}\cdot\lambda^6\cdot\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot exp\left[-\lambda\cdot\left(x^2+y^2+z^2\right)\right]\cdot\left(x^2+y^2+z^2\right)\cdot\left(x^2+y^2\right)\cdot z^2$
2	2	$\Psi\Psi_022(x,y,z,\lambda) := \frac{1}{2\cdot\pi}\cdot\lambda^6\cdot\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}}\cdot exp\left[-\lambda\cdot\left(x^2+y^2+z^2\right)\right]\cdot\left(x^2+y^2+z^2\right)\cdot\left(x^2+y^2\right)^2$

Banginių funkcijų tikimybės tankių algebrinės išraiškos Dekarto koordinačių sistemoje yra gana sudėtingos ir jas analizuoti pasinaudojame pilnų banginių funkcijų modulių kvadratų erdvinius (paviršinius) ir kontūrinius atvaizdus

Atlikdami būsenų vizualizaciją parodome kaip tikimybės tankis priklauso nuo dviejų kintamųjų *x* ir *z* kintamųjų (vienas yra fiksuotas y = 0), nes priklausomybė vaizduojama x-z plokštumoje. Kontūriniame grafike šviesiausia vieta reiškia didžiausia tikimybės tankį.

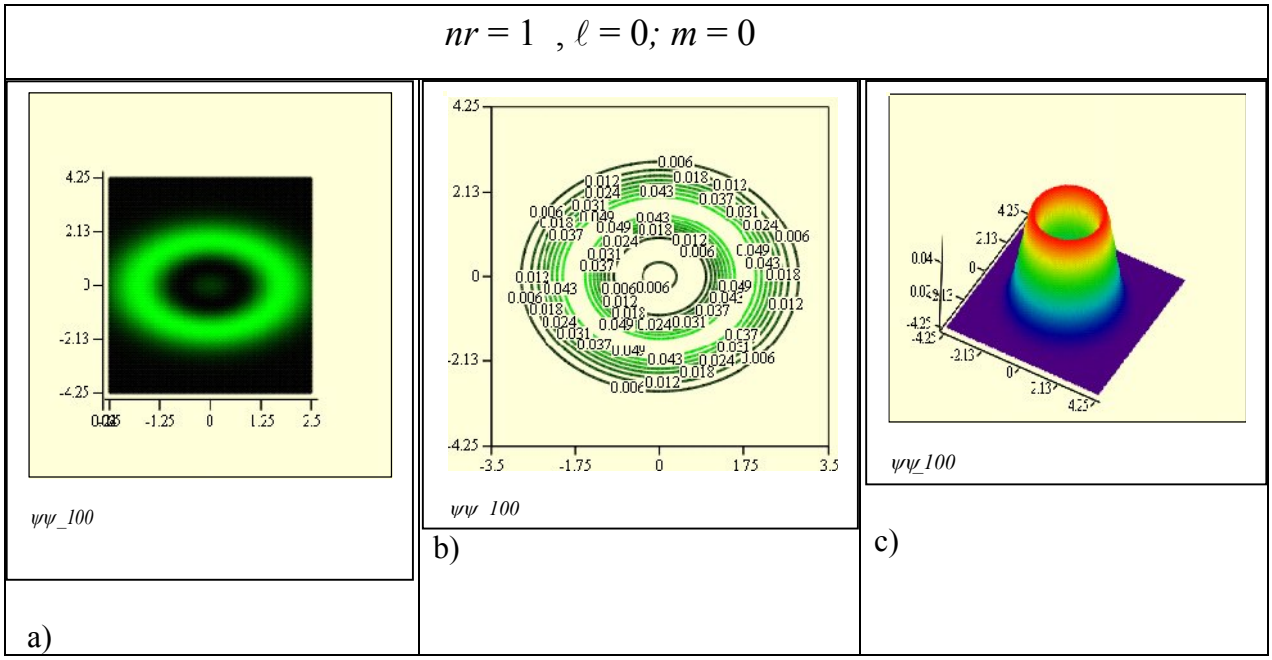
Dabar galime pavaizduoti kvantinio osciliatoriaus tikimybės tankio grafikus x-z plokštumoje būsenoms kai radialinis kvantinis skaičius $nr = 0, 1, 2, 3$; orbitinis kvantinis skaičius $\ell = 0$, magnetinis kvantinis skaičius $m = 0$. (21 pav.)



21 pav. Tikimybės tankio pasiskirstymas būsenos $nr = 0$, $\ell = 0$, $m = 0$

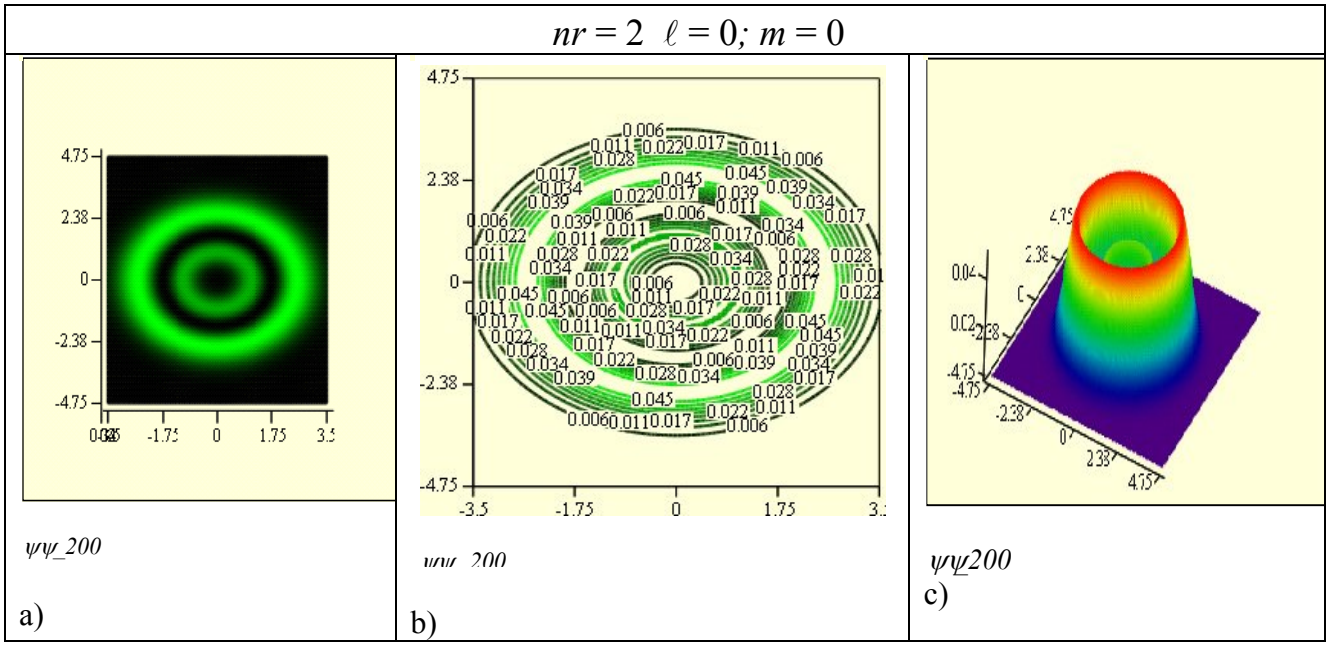
Šiuo atveju nagrinėjame kaip tikimybės tankio pasiskirstymo funkcija priklauso nuo radialinio kvantinio skaičiaus nr, kai orbitinis ℓ ir magnetinis m kvantinis skaičius nekinta. Žinome, kad orbitinis kvantinis skaičius ℓ nusako orbitalės formą. Kintant radialinio kvantinio skaičiaus nr vertei, kai orbitinis kvantinis skaičius $\ell = const$ tai tikimybės tankio pasiskirstymo funkcija pasižymi sferine simetrija, , t.y. turi rutulio formą.

Kai $nr = 0$, tuomet didžiausia tikimybės vertę iš kontūrinio grafiko (21 pav. a) nustatome, kad yra nulio taško aplinkoje ir lygi 0,066. Paviršiniame grafike (21 pav. c) tikimybės tankio funkcija vaizduoja erdvinį gražų kalniuką, parodantį, kad osciliatorius pagrindinėje būsenoje randasi arti potencialo minimumo, bet kaip ir vienmačiu atveju nenustygsta minimumo taške, o fliuktuoja nedidelėje to minimumo aplinkoje. Jame funkcijos dydis parodytas įvairiomis spektro spalvomis. Didžiausia tikimybės tankio vertė pavaizduota raudona spalva, o einant į mėlyną spektro pusę, funkcijos vertė mažėja ir pagaliau pati mėlyna spalva atitinka mažiausią funkcijos vertę (šiuo atveju beveik lygia nuliui).

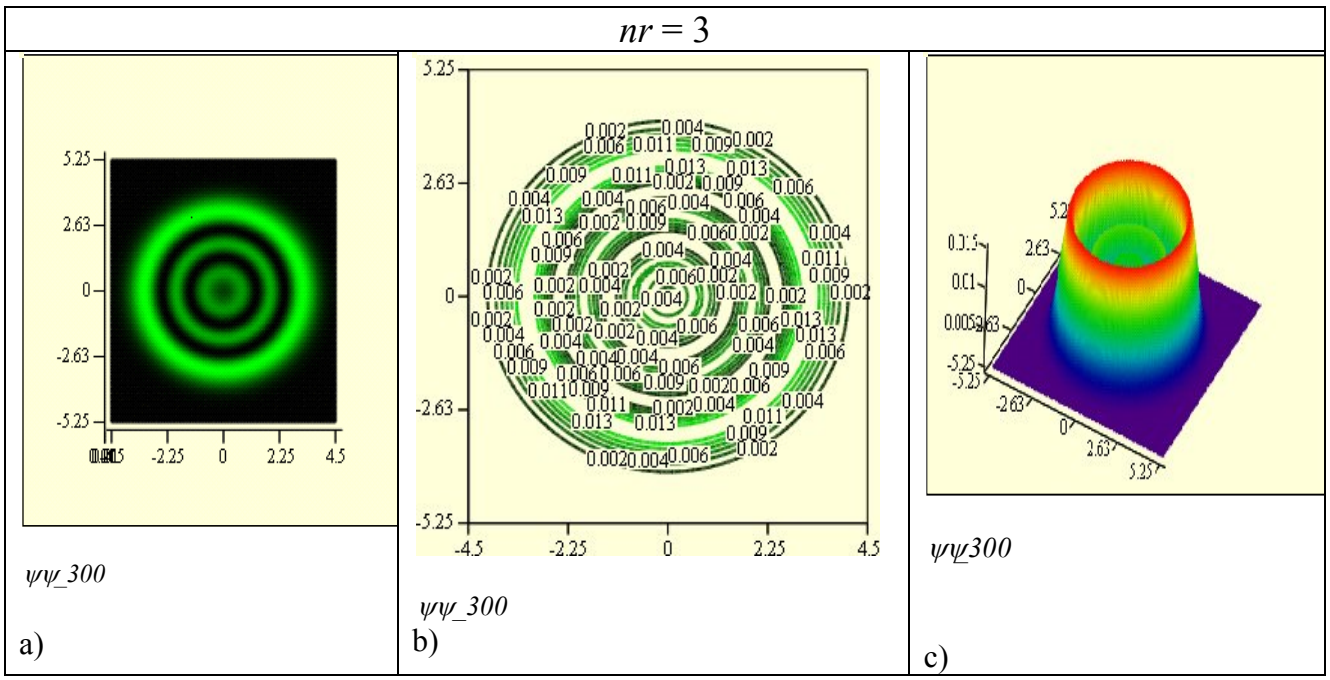


22 pav. Tikimybės tankio pasiskirstymas būsenos $nr = 1$, $\ell = 0$, $m = 0$

Kai $nr = 1$, tuomet centre nulinio taško aplinkoje tikimybės vertę artima nuliui 0,006. Tolstant nuo centro į dvi priešingas puses, tikimybė didėja, pasiekia maksimumą ir vėl mažėja.



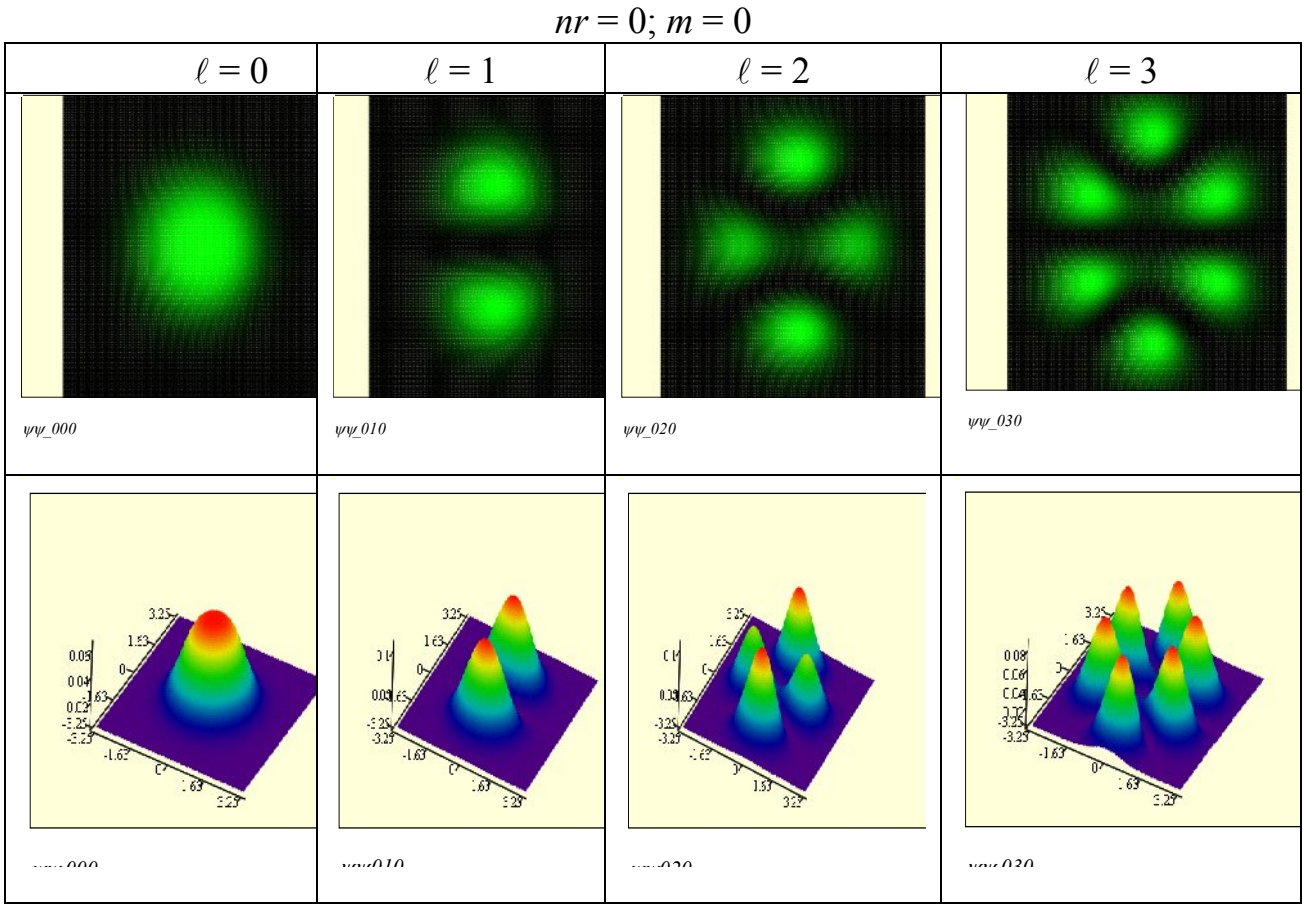
23 pav. Tikimybės tankio pasiskirstymas būsenos $nr = 2$, $\ell = 0$, $m = 0$



24 pav. Tikimybės tankio pasiskirstymas būsenos $nr = 3$, $\ell = 0$, $m = 0$

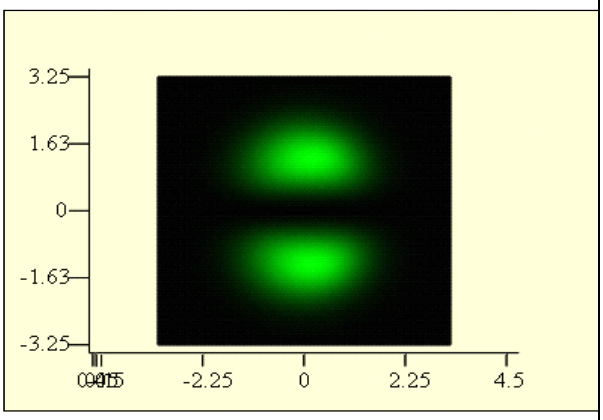
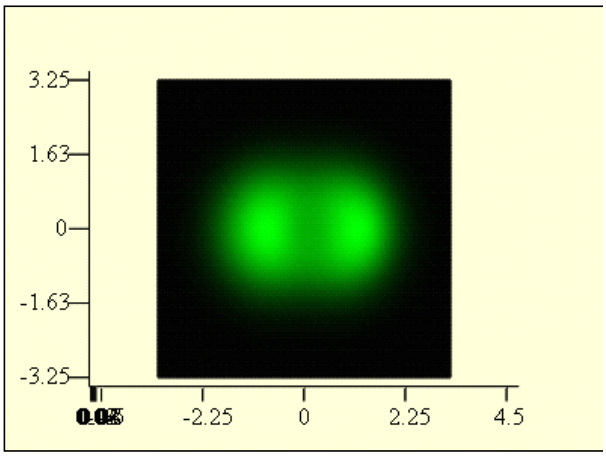
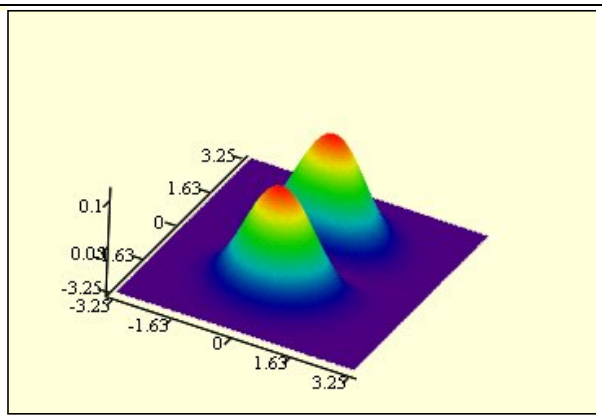
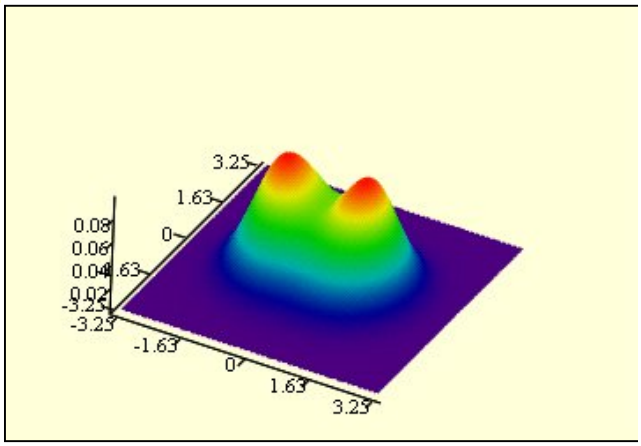
Kai radialinis kvantinis skaičius $nr = 2$ ir $nr = 3$, tuomet pastebime, kad nulinio taško apilinkoje šios funkcijos vertė yra artima nuliui, tačiau tolstant funkciją didėja ir pasiekia vertę kuri yra mažesnė už maksimalią, tai rodo atsiradęs papildomas neryškus žiedas (23 pav. a). Toliau tikimybė į abi priešingas puses mažėja. 23 pav. a) kontūriniame grafike matome, kad toliau seka šviesiausia žiedas, tai vieta kur tikimybės tankis yra didžiausia. Vadinasi, kai $nr = 2$ atsiranda vienas papildomas sferos žiedas (22 pav.), o kai $nr = 3$ - du papildomi sferos žiedai (23 pav.).

Panagrinėkime, kaip tikimybės tankio atvaizdas priklauso nuo orbitinio kvantinio skaičiaus ℓ, kai radialinis ir magnetinis kvantinis skaičius nekinta ($nr = 0$; $m = 0$). Didėjant orbitiniam kvantiniam skaičiui nebėra sferinės simetrijos, būdingos būsenai $nr = 0,1,2,3$, $\ell = 0$, $m = 0$. Be to, banginės funkcijos tikimybės tankis tuo greičiau sueina į nulį centre, kuo didesnis ℓ, tai matome iš paviršinių grafikų. Orbitinis kvantinis skaičius nusako taip pat ir skaičių mazginių plokštumų, kertančių koordinačių pradžią. Kai $\ell = 1$, sfera tarsi suskyla į dvi dalis ir tarp dviejų “hantelio”skilčių yra plokštuma (paveiksle xz plokštumoje tarpelis tarp dviejų skilčių uždažytas juodai), kurioje dalelės buvimo tikimybė lygi nuliui. Tai mazginė plokštuma.



24 pav. Tikimybės tankio pasiskirstymas būsenos $nr = 0$, $m = 0$

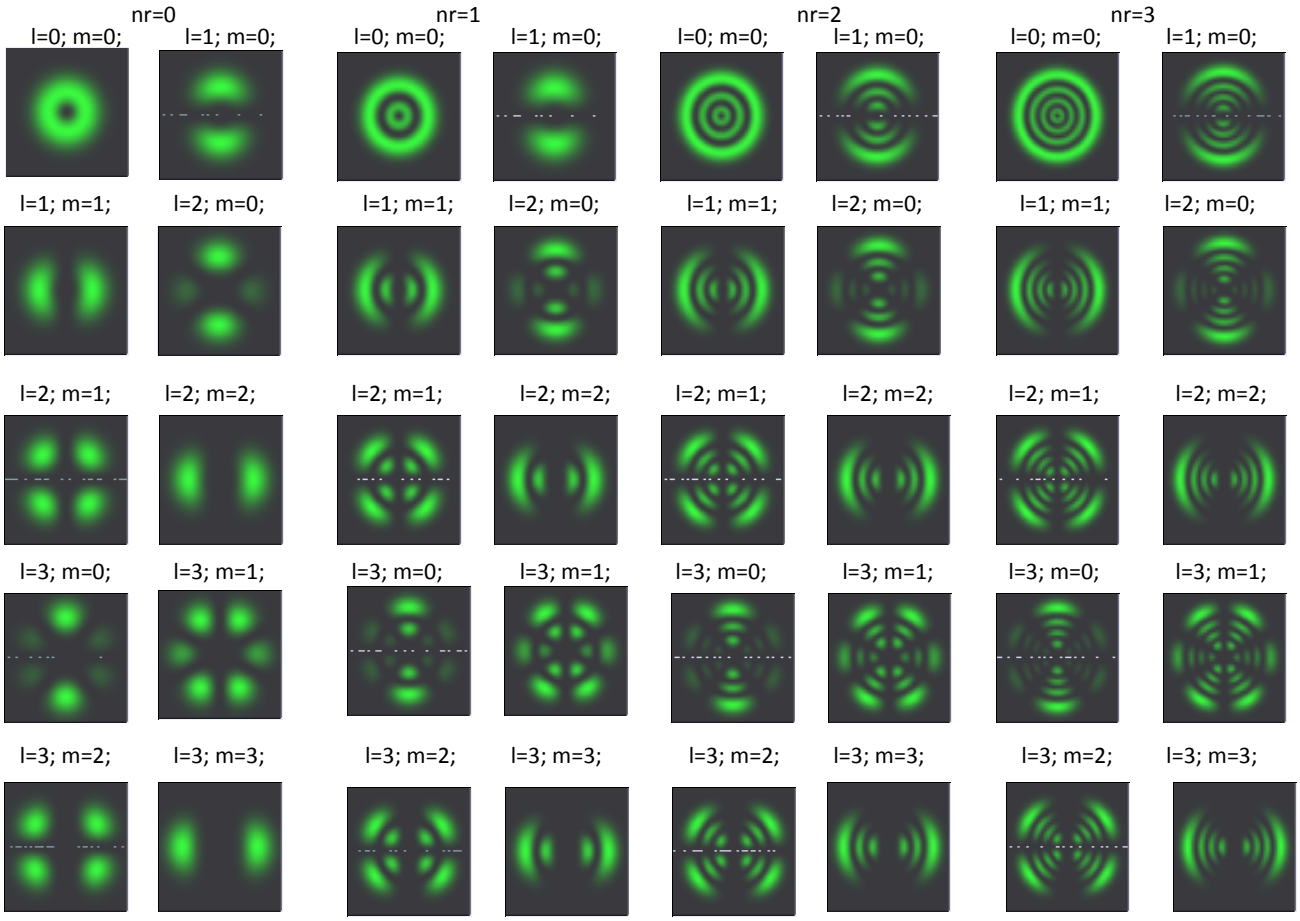
Banginė funkcija priklauso ir nuo magnetinio kvantinio skaičiaus *m*, kuris susietas su orbitiniu kvantiniu skaičiumi ℓ. Iš teorijos žinome, kad orbitalių orientacija erdvėje apibūdinama dar vienu kvantiniu skaičiumi, vadinamu *magnetiniu kvantiniu skaičiumi* m_l. Pavaizduokime tikimybės tankio funkciją būsenų, kai radialinis ir orbitinis kvantinis skaičius nekinta, o kinta magnetinis kvantinis skaičius.

$nr = 0,\ \ell = 1$	
m = 0	m = 1, m = -1
 *ψψ_010*	 *ψψ_011*
 *ψψ_010*	 *ψψ_011*

25 pav. Tikimybės tankio pasiskirstymas būsenos $nr = 0$, $\ell = 0$, $m = 1$

Iš 25 paveikslėlio matome, kad kintant magnetinio kvantinio skaičiaus vertei pasikeičia kiek yra galimų tikimybės tankio funkcijos maksimumų išsidėstymo erdvėje variantų. Pirmuoju atveju išvedę tiesę per funkcijos maksimalias vertes (kalnelius), ji yra statmena x ašiai. Antruoju atveju – tiesė bus statmena y ašiai.

Nagrinėdami kvantinio osciliatoriaus būsenas 26 pavekslėlyje pateikiame pilnų banginių funkcijų modulių kvadratų kontūrinius atvaizdus. Šiuose kreivėse matome, kad kiekvieno stulpelio kreivės atitinka tą pačią radialinio kvantinio skaičiaus n_r vertę, o kiekvienos eilutės kreivės – tą pačią orbitinio kvantinio skaičiaus ℓ vertę.



26 pav. Trimačio kvantinio osciliatoriaus būsenų vizualizacija (kontūriniai grafikai)

Iš trimačio kvantinio osciliatoriaus būsenų vizualizacijos galime pastebėti, kad didėjant radialiniam kvantiniam skaičiui *nr* ir nekintant kvantiniams skaičiams ℓ ir *m* banginės funkcijos tikimybės tankio funkcijos forma nekinta, tik atsiranda papildomi taškai kuriuose yra tikimybė aptikti dalelę.

IŠVADOS

Šiuolaikinėje fizikoje jau beveik nebeįmanomas reiškinių tyrimas ir analizavimas nepasitelkus informacinių technologijų. Mokslui progresuojant, reiškiniai tiriami vis plačiau, t.y. reiškinius stengiamasi tirti kaip realybės artutinumus, minimalizuojant jų supaprastinimą ir apimant kuo daugiau reiškinio savybių. Taigi reiškinių modeliavimui ir kompiuteriniui analizavimui šiuolaikinis mokslas teikia prioritetą.

Klasikiniu osciliatoriaus modeliu galima pasinaudoti nagrinėjant daug universalių fizikos reiškinių, pradedant nuo absoliučiai juodo kūno nagrinėjimo, kaip pavienių osciliatorių sistemos ir baigiant branduoline energetika.

Bakalauro darbe surinkome ir susisteminome teorinę medžiagą apie kvantinį osciliatorių. Naudojantis kompiuterine matematine sistema „*Mathcad 14 Professional*“ bei gautais analiziniais sprendiniais atlikome trimačio izotropinio kvantinio osciliatoriaus būsenų vizualizaciją. Išanalizavome, kaip kinta tikimybių tankių pasiskirstymo funkcija, keičiant konkrečius kvantinius skaičius.

Apibendrinus rezultatus, galima teigti, kad ryšys tarp matematinio reiškinio aprašymo ir jo kompiuterinės vizualizacijos leidžia giliau pažvelgti į nagrinėjamą problemą, geriau suprasti ir įtvirtinti analizuojamą medžiagą.

Medžiaga tiktų mokomajam darbui aukštojoje mokykloje, studijuojant kvantinės mechanikos temas susijusias su Šredingerio lygties taikymu.

LITERATŪRA

1. Banzaitis, A.; Grabauskas, D. *Kvantinė mechanika.* Vilnius: Mokslas, 1975. 318 p.
2. Brandt, Siegmund; Dahmen, Hans Dieter. *Iliustruotoji kvantinė mechanika.* [iš anglų kalbos vertė G. Kamuntavičius], Kaunas: Vytauto Didžiojo Universiteto leidykla, 1993. 275 p. ISBN9986-501-00-8
3. Burneikaitė, N.; Jarienė, R.; Jašinauskas, L.; Motiejūnienė, E.; Neseckienė, I.; Vingelienė, S. *Informacinių komunikacinių technologijų taikymo ugdymo procese galimybės. Rekomendacijos mokytojui*., Vilnius: Šviesa, 2005. ISBN 9986-03-576-7.
4. Buika ,G.; Getautis ,V.; Martynaitis ,V.; Rutkauskas, K. *Organinių junginių spektroskopija.* [žiūrėta: 2010 m. gegužės 5 d.]. Prieiga per internetą: <http://www.chemija.ctf.ktu.lt/organikai/spektr/Spektroskopija.pdf>
5. Burkhardt, Charles; Leventhal Jacob. *Foundations of Quantum Physics.* St. Louis: Springer, 2008. 530 p. ISBN: 978-0-387-77651-4
6. Cowan, Robert D. *The Theory of Atomic Structure and Spectra*. Los Alamos 1997. ISBN 0-520-03821-5.
7. Dargys, A.; ACUS ,A., *Fizika su kompiuteriu*. Vilnius: Ciklonas, 2003. 408 p. ISBN 995549736.
8. Flugge S, Springer-Verlag. *Practical quantum mechanics*.1971.
9. Gavriušinas, Vladimiras. *Optiniai Reiškiniai Puslaidininkiuose. I dalis.* Vilnius 2008.
10. Kvietkauskienė, G., Kvietkauskas V. Kompiuterinių programų panaudojimas mokant fizikos // *Fizika, informatika ir matematika bendrojo ugdymo ir aukštojoje mokykloje*. In III Respublikinės mokslinės praktinės konferencijos straipsniu rinkinys. Šiauliai: Šiaulių univ.l-kla, 2002. ISBN 9986382823
11. Požėla, Ignas; Radvilavičius, Česlovas. *Optika ir atomo fizika*, Kaunas: Technologija, 2008. 197 p. ISBN 9789955253662.
12. Tamašauskas, A.; Vosylius ,J.; Radvilavičius, Č. *Fizika 3.* Vilnius: Mokslas, 1992. 180 p.
13. *Harmonic oscillator*. Notes on Quantum Mechanics. [žiūrėta: 2010 m. gegužės 5 d.]. Prieiga per internetą: <http://quantum.bu.edu/notes/QuantumMechanics/HarmonicOscillator.pdf>

14. *Wave function in a harmonic oscillator* (chart).[žiūrėta 2010 m. gegužės 5 d.]. Prieiga per internetą: <http://keisan.casio.com/has10/Menu.cgi?lang=en&path=06000000.Science>.
15. *Гармонический осциллятор в квантовой механике*. [žiūrėta: 2010 m. gegužės 5 d.]. Prieiga per internetą: <http://www.neslozhno.ru/>
16. *Квантовый гармонический осциллятор*. Конспект лекции. [žiūrėta: 2010 m. gegužės 5 d.]. Prieiga per internetą: <http://teachmen.csu.ru/work/lectureOsc/>
17. Мелехов, А. П. *ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ*. Рязань. 2008. 23 p.
18. Мартинсон Л.К.; СМИРНОВ Е.В. *Квантовая теория*. МГТУ им. Н.Э. Баумана.2002. [žiūrėta: 2010 m. gegužės 5 d.]. Prieiga per internetą: <http://fn.bmstu.ru/phys/bib/physbook/tom5/about.htm>