
Оптоэлектронные и квантовые приборы и устройства

Лекция 2:

В.М. Шандаров

Томский государственный университет систем
управления и радиоэлектроники

Операторы

- В квантовой физике многие физические величины могут квантоваться, т.е. в некоторых случаях они принимают лишь дискретные значения. Для математического описания таких величин не пригодны обычные непрерывные функции, используемые в классической теории. Квантовая теория использует более общие математические методы, основой которых являются операторы.

Операторы

- **Оператор – это математический символ, определяющий совокупность действий, которые надо провести над заданной функцией U для получения некоторой другой функции V . В общем случае будем обозначать оператор символом \hat{L} , изображая его действие на некоторую функцию U в виде произведения $\hat{L}U$. В итоге оператор определяется соотношением:**

$$\hat{L}U = V$$

Наибольший практический интерес представляют линейные операторы, удовлетворяющие условию:

$$\hat{L}[C_1U_1(x) + C_2U_2(x)] = C_1\hat{L}U_1(x) + C_2\hat{L}U_2(x)$$

C_1 и C_2 – произвольные постоянные

Операторы

Самосопряженный линейный оператор должен удовлетворять соотношению:

$$\int U_1(x) \hat{L} U_2(x) dx = \int U_2(x) \hat{L}^* U_1(x) dx$$

\hat{L}^* – оператор, комплексно – сопряженный

Операторы можно складывать, вычитать и перемножать по правилам обычной алгебры. Однако при перемножении нельзя менять порядок сомножителей.

Собственное значение оператора

- В ряде случаев воздействие оператора \hat{L} на некоторую функцию $U(x)$ эквивалентно умножению этой функции на постоянную L . Эта постоянная и называется собственным значением оператора

$$\hat{L}U(x) = L \cdot U(x)$$

функция $U(x)$, удовлетворяющая этому соотношению, называется собственной функцией данного оператора

Собственное значение оператора

- В случае линейного дифференциального оператора уравнение

$$\hat{L}U(x) = L \cdot U(x)$$

является линейным дифференциальным уравнением. Известно, что такое уравнение для заданных граничных условий имеет ненулевые решения лишь при определенных значениях L . Эти постоянные и являются собственными значениями оператора.

Дифференциальный оператор, как правило, имеет множество собственных значений и собственных функций. Совокупность всех собственных значений образует спектр, который может быть как сплошным, так и дискретным.

Дискретный спектр собственных значений оператора

- С примером дискретного спектра встречаемся, решая, например, задачу о движении частицы между двумя отражающими плоскостями (или о модах планарного оптического волновода).
- Пусть частица движется вдоль оси x между плоскостями $x=0$ и $x=a$. Полагаем, что потенциальная энергия U частицы при $0 < x < a$ равна нулю. При $x=0$ и $x=a$ она становится бесконечной ($U \rightarrow \infty$). При этих условиях частица может находиться лишь внутри промежутка между плоскостями, поскольку она не в состоянии преодолеть бесконечно высокий потенциальный барьер. Данные плоскости для частицы являются идеально отражающими. В этом случае говорят, что частица находится в бесконечно глубокой потенциальной яме. Движение частицы описывается уравнением Шредингера в форме:

Дискретный спектр собственных значений оператора

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{h^2}W\psi = 0 \quad \text{при } (0 \leq x < a)$$

В точках $x=0$; $x=a$ функция ψ обращается в 0 (поскольку стенки – идеально отражающие, то вероятность нахождения на них частицы равна нулю). Решение этого уравнения ищем в виде:

$$\psi = [A \cdot \cos(qx) + B \cdot \sin(qx)] \cdot \exp\left(i \frac{W}{h} t\right)$$

где $q = \sqrt{\frac{2m}{h^2}W}$

Дискретный спектр собственных значений оператора

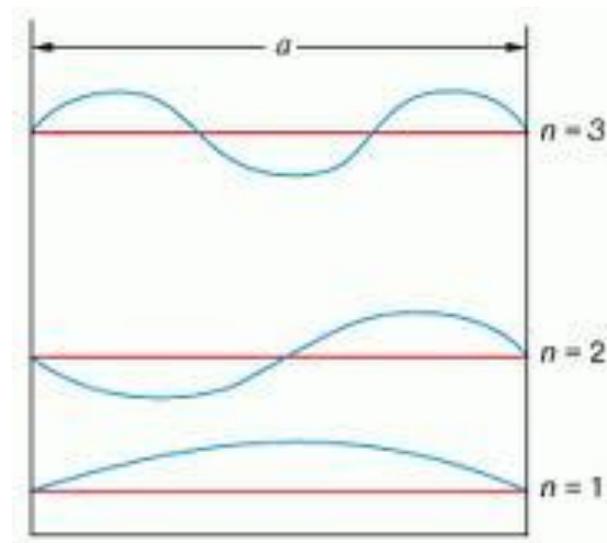
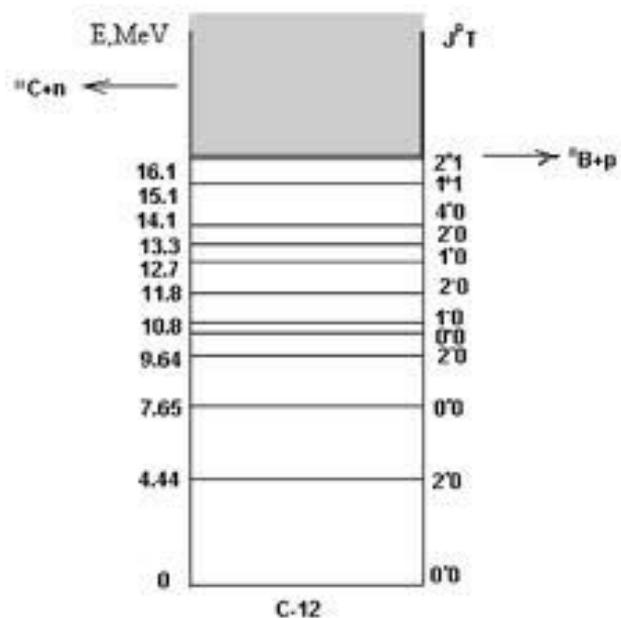
Исходя из граничных условий $\psi = 0|_{x=0, x=a}$ найдем:

$A = 0$; $q = \frac{n\pi}{a}$ где $n=1, 2, 3, \dots$ Тогда:

$$W = \frac{q^2 \hbar^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2a^2 m}$$

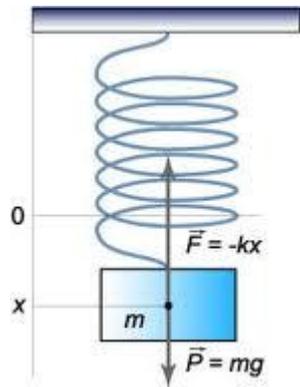
Таким образом, полная энергия частицы в данной задаче может принимать лишь дискретные значения W_n , соответствующие различным значениям n . Эти значения образуют бесконечный ряд дискретных энергетических уровней. При переходе частицы из одного состояния в другое, ее энергия должна меняться скачком, т. е. в данной ситуации имеет место квантование энергии.

Дискретный спектр собственных значений оператора



Гармонический осциллятор

Любая система, совершающая гармонические колебания с малой амплитудой вблизи состояния устойчивого равновесия (атом в молекуле, электрон в атоме, математический маятник и т.д.) представляет собой гармонический осциллятор.



Рассмотрим частицу с массой m , смещенную на некоторое малое расстояние относительно положения устойчивого равновесия. На частицу действует возвращающая упругая сила. Считая, что частица движется вдоль прямой, уравнение ее движения можно записать в виде:

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F = -\alpha \cdot x$$

Гармонический осциллятор

- Здесь x – отклонение частицы от положения равновесия;

$$F = -\alpha \cdot x \quad - \quad \text{упругая сила,}$$

возвращающая ее в это положение;

α – величина, называемая коэффициентом упругости.

Решение уравнения

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{\alpha}{m} x = 0$$

при $\alpha = \text{const}$:

Гармонический осциллятор

в вещественной форме имеет вид:

$$x = A \cdot \cos\left(\sqrt{\frac{\alpha}{m}} \cdot t + \varphi\right)$$

Видим, что в указанных условиях частица совершает около положения равновесия гармонические колебания с частотой, определяемой только физическими параметрами m и α :

$$\omega = \sqrt{\frac{\alpha}{m}}$$

Гармонический осциллятор

- Модель гармонического осциллятора применима к любой системе, совершающей гармонические колебания с малой амплитудой вблизи состояния устойчивого равновесия (атом в молекуле, электрон в атоме, математический маятник и т.д.).
- Покажем, что энергия осциллятора в силовом поле не может принимать любые значения, она оказывается квантованной.

Гармонический осциллятор

- Полная энергия осциллятора в силовом поле, как отмечалось, равна:

- $W = W_k + U$ где

$$W_k = \frac{mv^2}{2} = \frac{p^2}{2m}$$

- Потенциальная энергия U связана с действующей на частицу силой F соотношением: $\overline{F} = -gradU$

- В нашем одномерном случае:

$$F = -\frac{dU}{dx} = -\alpha \cdot x$$

Гармонический осциллятор

- Интегрируя это соотношение, найдем U :

$$U = \int \alpha \cdot x \cdot dx = \frac{\alpha \cdot x^2}{2} + C$$

- Полагая $C=0$ (константа интегрирования в каждой конкретной задаче определяется начальными условиями), получим:

$$U = \frac{\alpha \cdot x^2}{2}$$

- И найдем полную энергию осциллятора

Гармонический осциллятор

$$W = \frac{p^2}{2m} + \frac{\alpha \cdot x^2}{2} = \frac{mv^2}{2} + \frac{\alpha \cdot x^2}{2} = \frac{m}{2} \left[\left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{\alpha}{m} x^2 \right]$$

Состояние гармонического осциллятора с точки зрения квантовой теории характеризуется волновой функцией ψ , удовлетворяющей уравнению Шредингера:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{h^2} \left[W - \frac{\alpha x^2}{2} \right] \cdot \psi = 0$$

Гармонический осциллятор

- Решение этого уравнения хорошо исследовано. Оно является конечным и однозначным (как отмечалось, **волновая функция должна отвечать таким условиям**) на интервале $-\infty < X < \infty$ при дискретных значениях постоянной W :

$$W = W_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdot h\omega$$

- где $n = 0, 1, 2, \dots$ – любое целое число.

Гармонический осциллятор

- Так, энергия гармонического осциллятора, находящегося в поле потенциальных сил, может принимать только дискретные значения и при изменении его состояния изменяется скачком на величину, кратную энергии кванта $h\omega$.
- Наименьшая величина энергии гармонического осциллятора:
$$W_0 = \frac{1}{2} h\omega$$
- Она называется нулевой энергией гармонического осциллятора.

Гармонический осциллятор

- Важность полученного результата заключается в том, что любая квантовая система при наличии каких – либо сил, внутренних или внешних, во многих случаях проявляет свойства дискретности ее энергии, т.е. ее энергия квантуется.