ЯДЕРНЫЕ СТЕПЕНИЯ СВОБОДЫ В АТОМНОЙ ФИЗИКЕ

Е.В. Грызлова

НИИЯФ МГУ

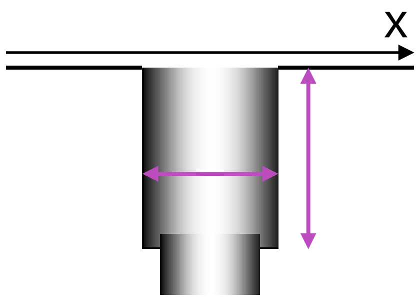
Весенний семестр 2020 г.

- «Разминка»
- Спектры систем со сферической симметрией
- Сжатые атомы
- Двухуровневая система с сильно связанными состояниями
- Атомная спектроскопия антипротония
- Поляризация излучения и дихроизм
- Плоская волна и волновой пакет – волна вещества.
- Нобелевская премия по физике 2012 года.
Изучение одиночной квантовой системы
- Ионные ловушки
- Когерентные и сжатые состояния волновых пакетов
- Начала теории рассеяния
- Особенности резонансного рассеяния и неэкспоненциальный распад

1. «Разминка»:

а) Квантование одномерной потенциальной ямы: число стационарных состояний.
б) Число узлов волновых функций дискретных состояний.
в) вырождение уровней и эффект Ландау-Зинера.
г) Проявление вырождения в спектрах.

Квантование одномерной потенциальной ямы



Одномерная потенциальная яма конечной глубины

- ✓Всегда ли есть дискретный уровень?
- ✓Как изменяется число уровней при изменении ширины/глубины ямы?
- ✓Где локализована волновая функция частицы?

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\cdot\varphi(\vec{r})$$

$\hbar = 1,\ m = 1$ - атомная система единиц

$$-\frac{1}{2}\Delta\varphi(\vec{r}) + V(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\cdot\varphi(\vec{r})$$

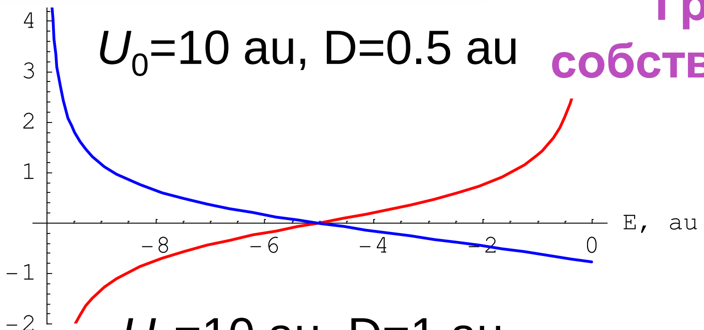
$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\cdot\varphi(x)$$

$$V(x) = \begin{cases} U, & 0 < x < D \\ 0 & \end{cases}$$

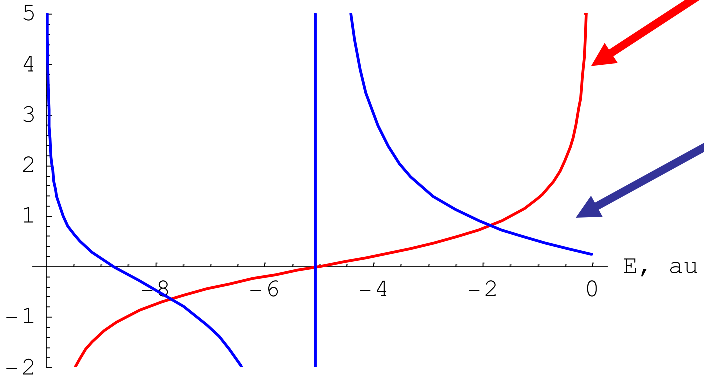
Квантование одномерной потенциальной ямы

Графическое решение уравнения на собственные значения для одномерной ямы

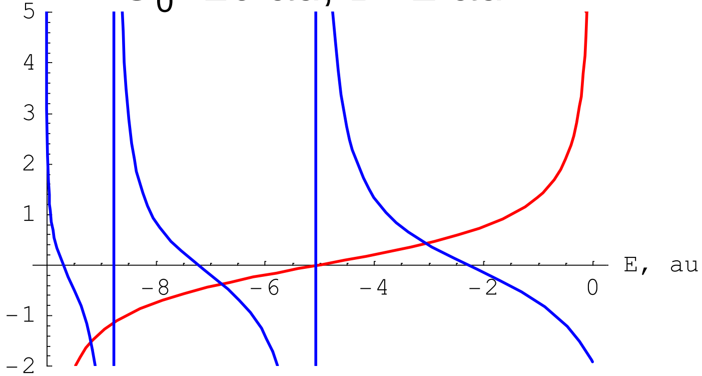
U_0=10 au, D=0.5 au



U_0=10 au, D=1 au



U_0=10 au, D=2 au



$$\boxed{\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1k_2} = ctg\,(k_2 \cdot d)}$$

где волновые вектора - действительны

$$k_1 = \sqrt{-2 \cdot E},\; k_2 = \sqrt{2 \cdot (E - U_0)}$$

$$\frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1k_2} = \frac{2E - U_0}{\sqrt{-E}\sqrt{E - U_0}} \rightarrow \begin{cases} \infty, & E \rightarrow 0 \\ -\infty, & E \rightarrow U_0 \end{cases}$$

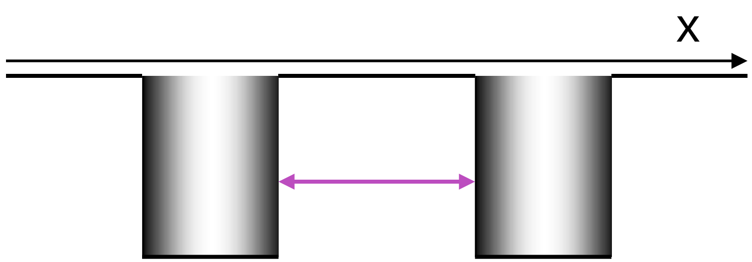
Функция монотонно растет в области определения

$$ctg\,(k_2 d) = ctg\,(\sqrt{2(E - U_0)}d) \rightarrow \begin{cases} ctg\,(\sqrt{-2U_0}d), & E \rightarrow 0 \\ \infty, & E \rightarrow U_0 \end{cases}$$

Функция падает до фиксированного значения в нуле

Обязательно есть хотя бы одно решение

Число узлов волновых функций дискретных состояний



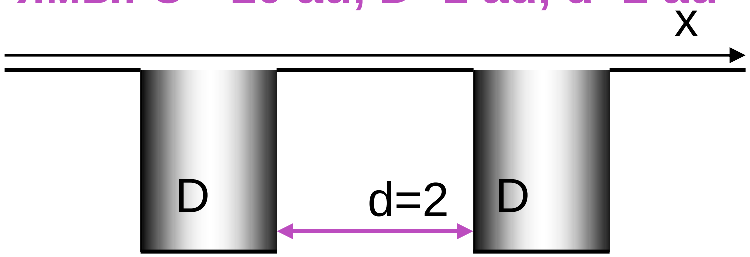
Две одинаковые потенциальные ямы

✓Сколько дискретных уровней в яме?
✓Как изменяется число уровней при сближении/удалении ям?
✓Где локализована волновая функция частицы, есть ли вероятность обнаружить частицу вне ямы?
✓Как понять, что найденная волновая функция является функцией основного состояния?

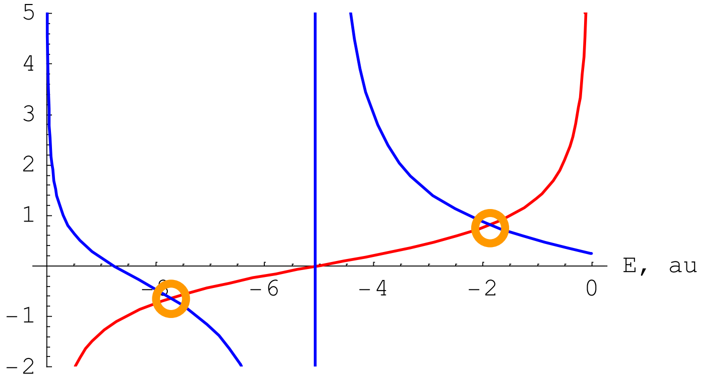
✓Теорема о числе узлов волновой функции дискретного состояния
✓Квазипересечение квантовых уровней

Число узлов волновых функций дискретных состояний

Две одинаковые потенциальные ямы: U=-10 au, D=1 au, d=2 au

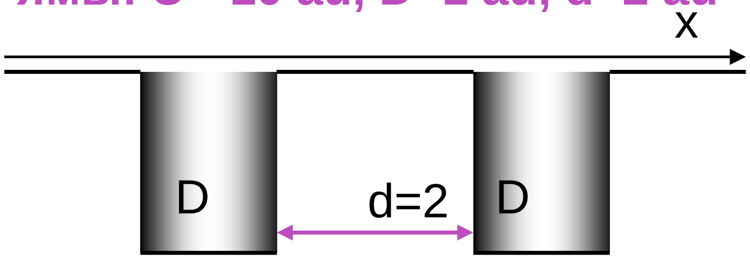


U_0=10 au, D=1 au

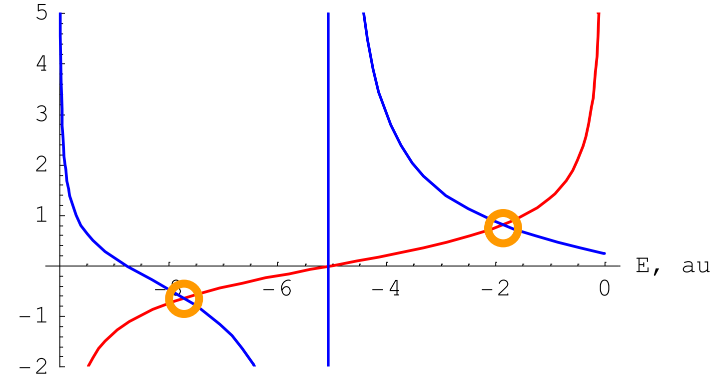


Число узлов волновых функций дискретных состояний

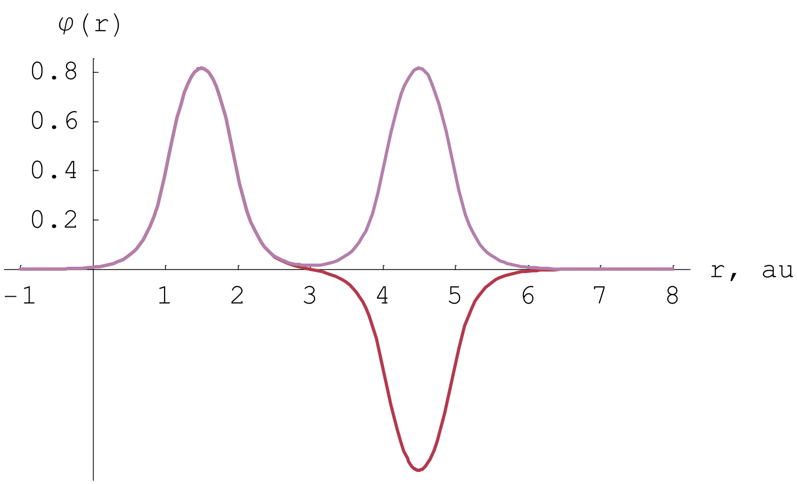
Две одинаковые потенциальные ямы: U=-10 au, D=1 au, d=2 au



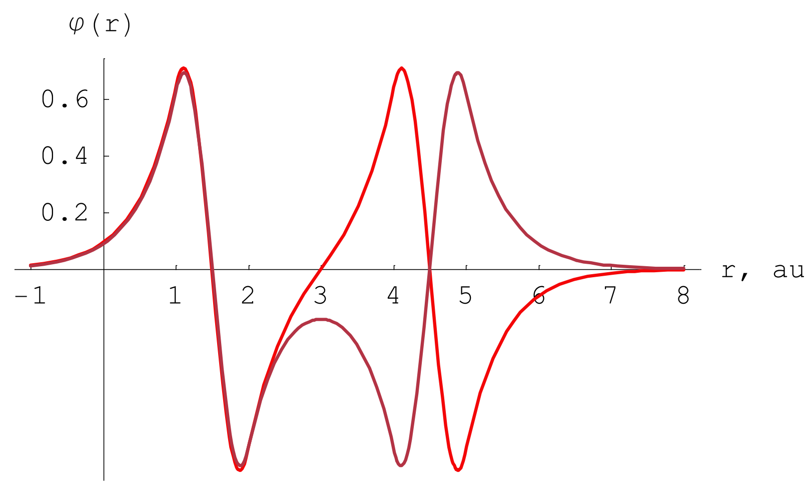
U_0=10 au, D=1 au



1,2-й уровень

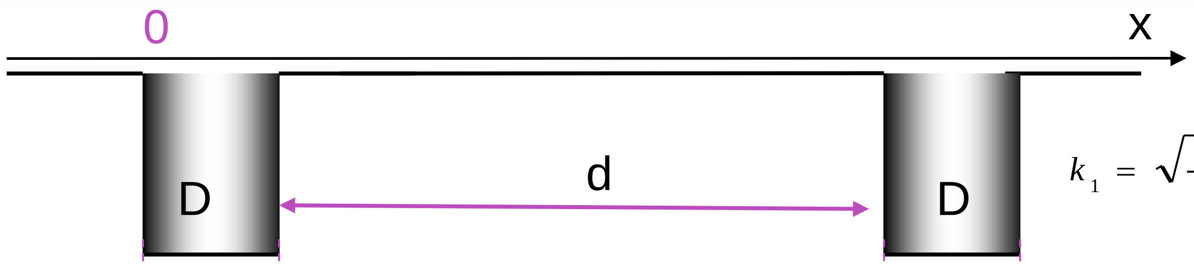


3,4-й уровень



Какая волновая функция соответствует основному состоянию системы?

Число узлов волновых функций дискретных состояний



$$k_1 = \sqrt{-2\cdot E},\quad k_2 = \sqrt{2\cdot\left(E - U_0\right)}$$

$\exp k_1 x$ | $\sin k_2 x$, $\cos k_2 x$ | $\exp k_1 x$, $\exp(-k_1 x)$ | $\sin k_2 x$, $\cos k_2 x$ | $\exp(-k_1 x)$

$$a_1 = a_2;$$

$$k_1 a_1 = k_2 b_2;$$

$$a_2 \cos\left(k_2 D\right) + b_2 \sin\left(k_2 D\right) = a_3 \exp\left(k_1 D\right) + b_3 \exp\left(-k_1 D\right);$$

$$-a_2 k_2 \sin\left(k_2 D\right) + b_2 k_2 \cos\left(k_2 D\right) = a_3 k_1 \exp\left(k_1 D\right) - b_3 k_1 \exp\left(-k_1 D\right);$$

$$a_3 \exp\left(k_1[D+d]\right) + b_3 \exp\left(-k_1[D+d]\right) = a_4 \cos\left(k_2[D+d]\right) + b_4 \sin\left(k_2[D+d]\right);$$

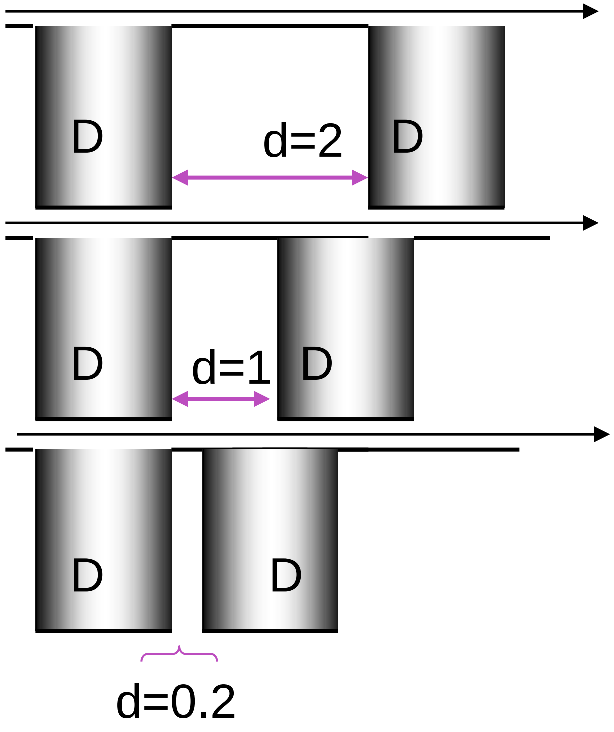
$$a_3 k_1 \exp\left(k_1[D+d]\right) - b_3 k_1 \exp\left(-k_1[D+d]\right) = -a_4 k_2 \sin\left(k_2[D+d]\right) + b_4 k_2 \cos\left(k_2[D+d]\right);$$

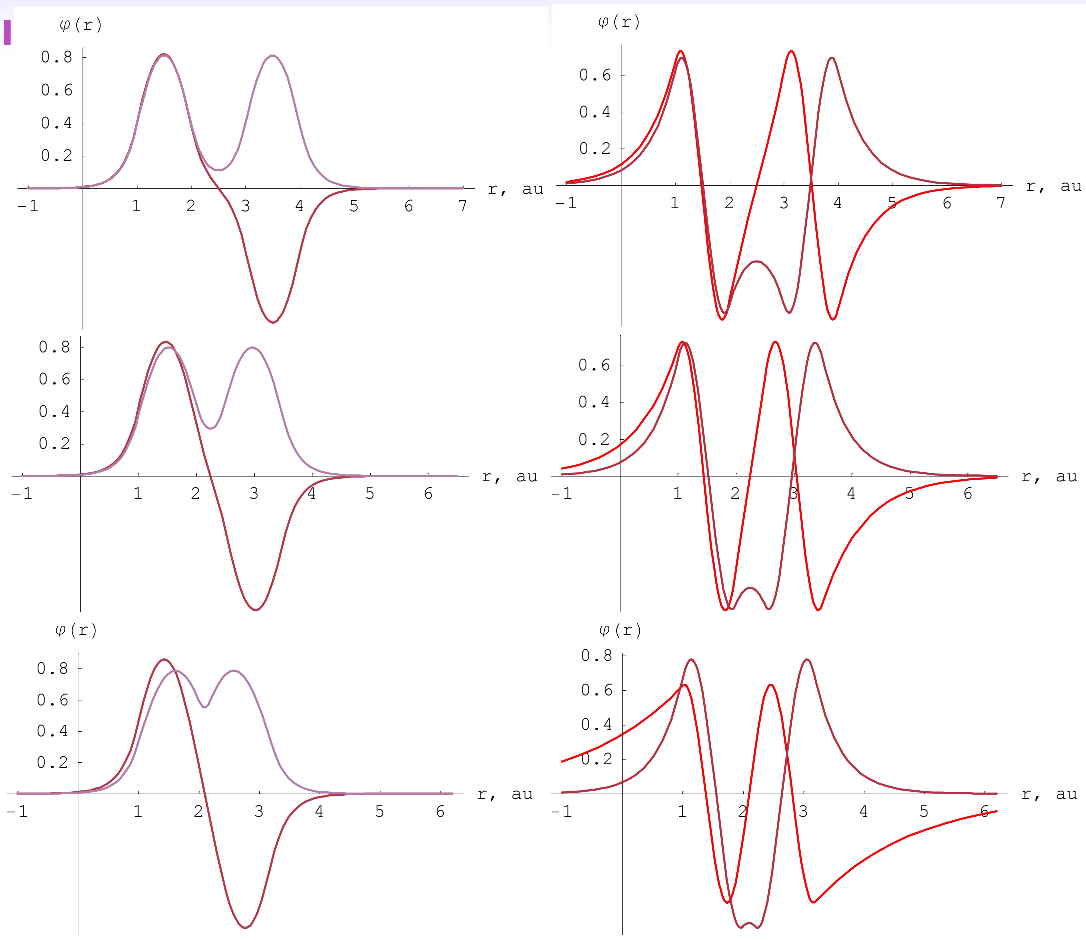
$$a_4 \cos\left(k_2[2D+d]\right) + b_4 \sin\left(k_2[2D+d]\right) = b_5 \exp\left(-k_1[2D+d]\right);$$

$$-a_4 k_2 \sin\left(k_2[2D+d]\right) + b_4 k_2 \cos\left(k_2[2D+d]\right) = -b_5 k_1 \exp\left(-k_1[2D+d]\right);$$

Число узлов волновых функций дискретных состояний

Две одинаковые потенциальные ямы: U=-10 au, D=1 au





Число узлов волновых функций дискретных состояний

Число узлов связанных состояний

Вронскиан $W(\psi_1(r),\psi_2(r)) = \psi_1(r)\cdot\psi'_2(r) - \psi'_1(r)\cdot\psi_2(r)$

Теорема вронскиана

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi_1(r) + \hat{V}_1(r)\psi_1(r) = 0;$$

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi_2(r) + \hat{V}_2(r)\psi_2(r) = 0;$$

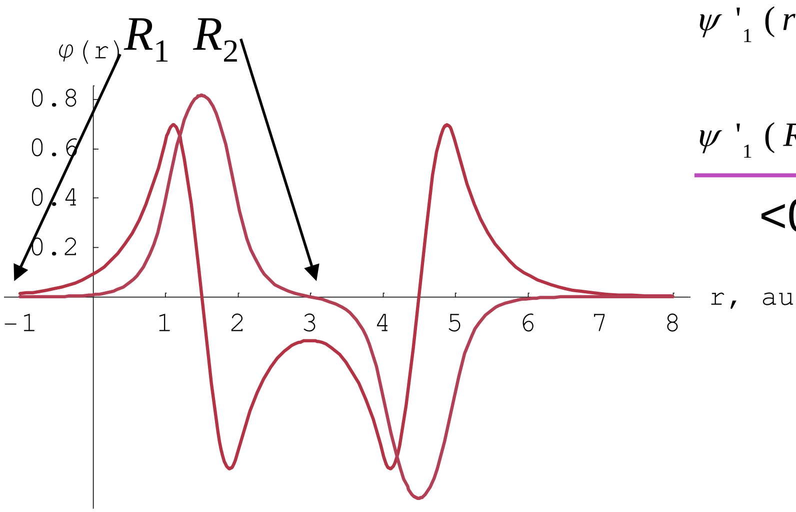
$$\boxed{W(\psi_1,\psi_2)\Big|_{R_1}^{R_2} = \int_{R_1}^{R_2}(\hat{V}_1(r) - \hat{V}_2(r))\psi_1(r)\psi_2(r)\,dr}$$

Следствие для решения уравнения Шредингера

$$W(\psi_1,\psi_2)\Big|_{R_1}^{R_2} = (E_1 - E_2)\int_{R_1}^{R_2}\psi_1(r)\psi_2(r)\,dr$$

$$\psi'_1(r)\psi_2(r)\Big|_{R_1}^{R_2} = (E_2 - E_1)\int_{R_1}^{R_2}\psi_1(r)\psi_2(r)\,dr$$

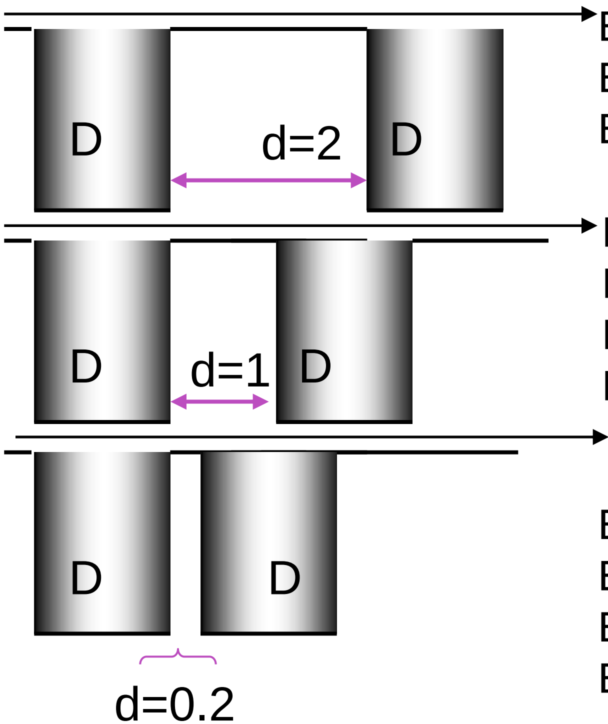
$$\underbrace{\psi'_1(R_2)\psi_2(R_2)}_{<0} - \underbrace{\psi'_1(R_1)\psi_2(R_1)}_{>0} = (E_2 - E_1)\int_{R_1}^{R_2}\psi_1(r)\psi_2(r)\,dr$$



Большей энергии дискретного состояния соответствует волновая функция с большим числом узлов

Вырождение уровней и эффект Ландау-Зинера

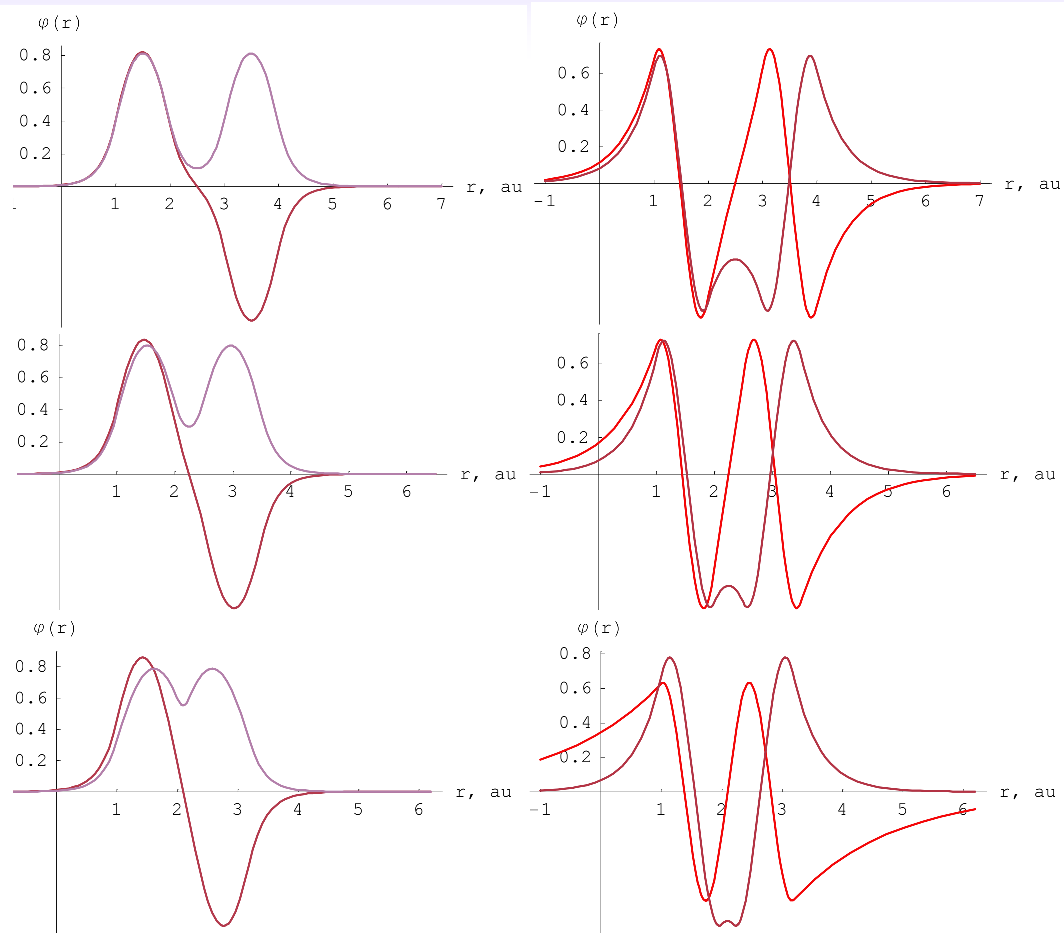
Две одинаковые потенциальные ямы: U=-10 au, D=1 au



E_1=-7.7055
E_2=-7.7045
E_3=-1.8942
E_4=-1.8290

E_1=-7.7285
E_2=-7.6814
E_3=-2.0590
E_4=-1.5929

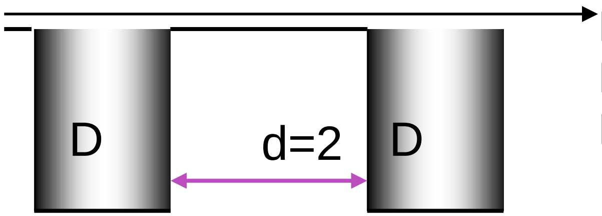
E_1=-8.2904
E_2=-7.2080
E_3=-2.6886
E_4=-0.1824



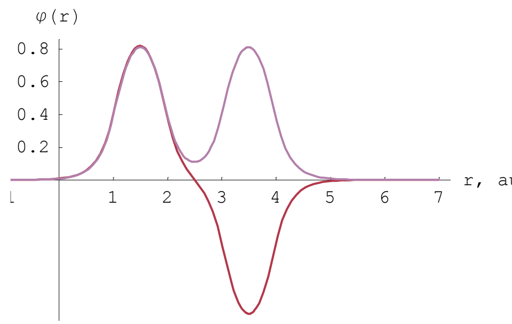
Может ли верхний уровень быть «вытолкнут» из ямы?

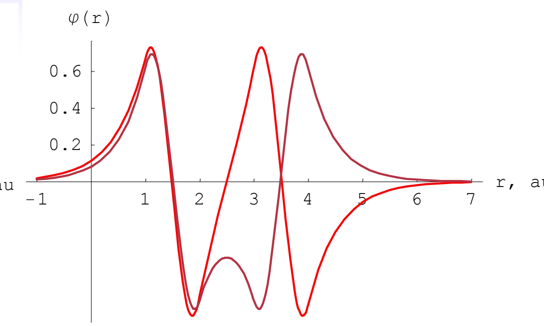
Вырождение уровней и эффект Ландау-Зинера

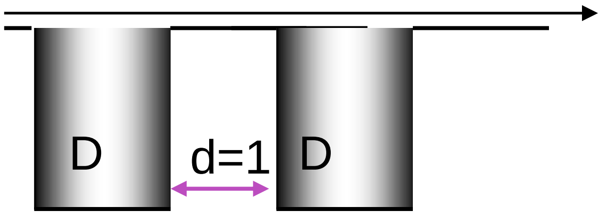
Две одинаковые потенциальные ямы: U=-10 au, D=1 au



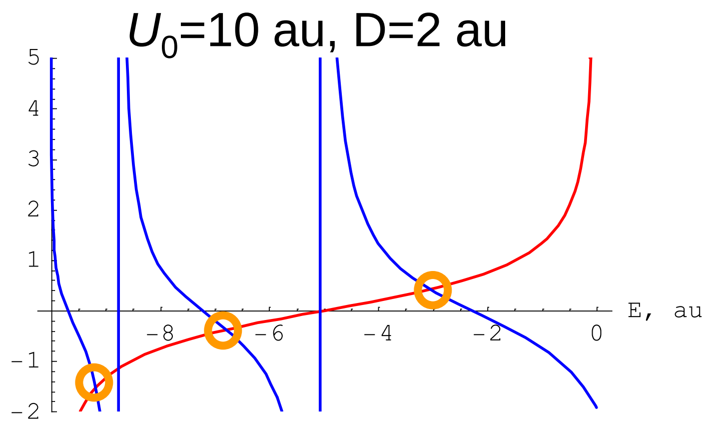
E_1=-7.7055
E_2=-7.7045
E_3=-1.8942
E_4=-1.8290

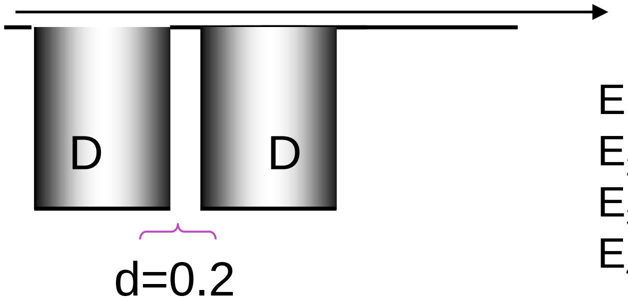




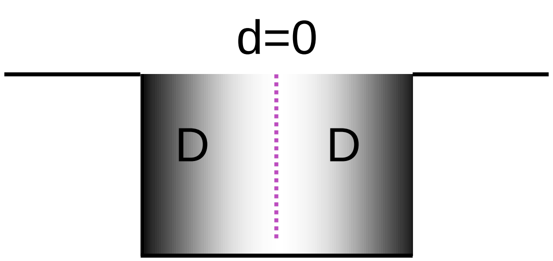


E_1=-7.7285
E_2=-7.6814
E_3=-2.0590
E_4=-1.5929

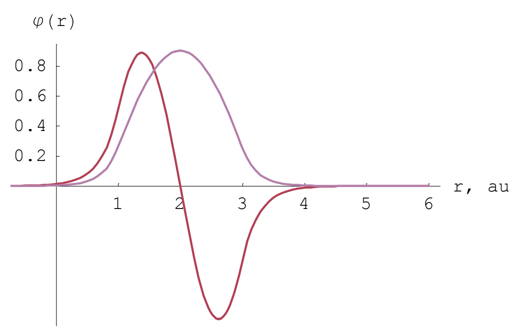


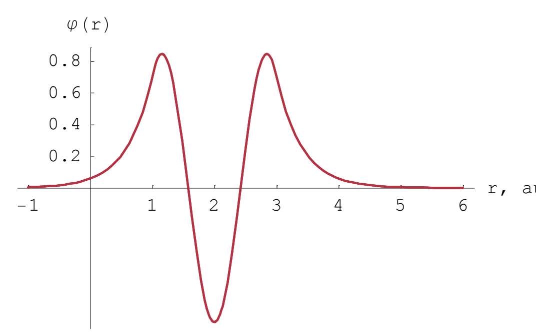


E_1=-8.2904
E_2=-7.2080
E_3=-2.6886
E_4=-0.1824



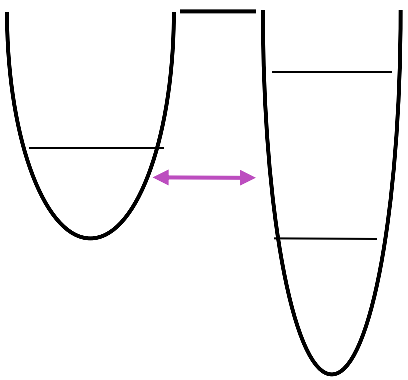
E_1=-9.1803
E_2=-6.7791
E_3=-3.0542





Вырождение уровней и эффект Ландау-Зинера

Квазиересечение квантовых уровней



$\hat{H}_0$ - Гамильтониан при некотором r_0

$E_1 \to \psi_1(r); \quad E_2 \to \psi_2(r)$ - волновые функции для близких энергий

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(r)$ - гамильтониан при $r_0+\delta r$

$$\hat{V}(r) = \delta r \frac{\partial \hat{H}_0}{\partial r}$$

Ищем решение в виде: $\psi_0(r) = c_1 \cdot \psi_1(r) + c_2 \cdot \psi_2(r).$

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}(r))\psi(r) = E \cdot \psi(r)$$

$$c_1(E_1 + \hat{V}(r) - E)\psi_1(r) + c_2(E_2 + \hat{V}(r) - E)\psi_2(r) = 0 \qquad \cdot / \psi_1^*(r), \psi_2^*(r)$$

$$c_1(E_1 + V_{11} - E) + c_2 V_{12} = 0$$

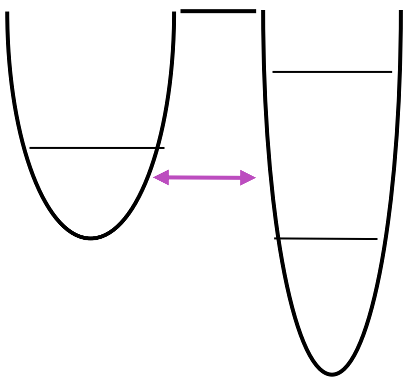
$$c_1 V_{21} + c_2(E_2 + V_{22} - E) = 0$$

$$\begin{vmatrix} E_1 + V_{11} - E & V_{12} \\ V_{21} & E_2 + V_{22} - E \end{vmatrix} = 0$$

$$E = \frac{1}{2}\left(E_1 + V_{11} + E_2 + V_{22} \pm \sqrt{(E_1 + V_{11} - E_2 - V_{22})^2 + |V_{12}|^2} \right)$$

Вырождение уровней и эффект Ландау-Зинера

Квазипересечение квантовых уровней



$\hat{H}_0$ - Гамильтониан при некотором r_0

$E_1 \to \psi_1(r); \quad E_2 \to \psi_2(r)$ - волновые функции для близких энергий

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(r)$ - гамильтониан при $r_0+\delta r$

$$\hat{V}(r) = \delta r \frac{\partial \hat{H}_0}{\partial r}$$

Ищем решение в виде: $\psi_0(r) = c_1 \cdot \psi_1(r) + c_2 \cdot \psi_2(r).$

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}(r))\psi(r) = E \cdot \psi(r)$$

$$c_1(E_1 + \hat{V}(r) - E)\psi_1(r) + c_2(E_2 + \hat{V}(r) - E)\psi_2(r) = 0 \qquad \cdot / \psi_1{}^*(r), \psi_2{}^*(r)$$

$$\boxed{E_1 + V_{11} - E_2 - V_{22} = 0; \quad V_{12} = 0.}$$

$$c_1(E_1 + V_{11} - E) + c_2 V_{12} = 0$$

$$c_1 V_{21} + c_2(E_2 + V_{22} - E) = 0$$

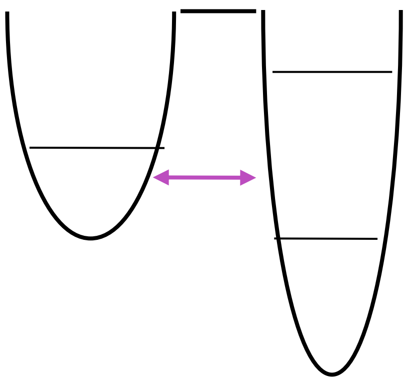
$$\begin{vmatrix} E_1 + V_{11} - E & V_{12} \\ V_{21} & E_2 + V_{22} - E \end{vmatrix} = 0$$

Одновременное выполнение уравнений возможно только если V_{12}=0 тождественно, например для состояний с разной симметрией

$$E = \frac{1}{2}\left(E_1 + V_{11} + E_2 + V_{22} \pm \sqrt{(E_1 + V_{11} - E_2 - V_{22})^2 + |V_{12}|^2} \right)$$

Вырождение уровней и эффект Ландау-Зинера

Квазипересечение квантовых уровней



$\hat{H}_0$ - Гамильтониан при некотором r_0

$E_1 \to \psi_1(r); \quad E_2 \to \psi_2(r)$ - волновые функции для близких энергий

$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(r)$ - гамильтониан при $r_0+\delta r$

$$\hat{V}(r) = \delta r \frac{\partial \hat{H}_0}{\partial r}$$

Ищем решение в виде: $\psi_0(r) = c_1 \cdot \psi_1(r) + c_2 \cdot \psi_2(r).$

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}(r))\psi(r) = E \cdot \psi(r)$$

$$c_1(E_1 + \hat{V}(r) - E)\psi_1(r) + c_2(E_2 + \hat{V}(r) - E)\psi_2(r) = 0 \qquad \cdot / \psi_1^*(r), \psi_2^*(r)$$

$$c_1(E_1 + V_{11} - E) + c_2 V_{12} = 0$$

$$c_1 V_{21} + c_2(E_2 + V_{22} - E) = 0$$

$$\begin{vmatrix} E_1 + V_{11} - E & V_{12} \\ V_{21} & E_2 + V_{22} - E \end{vmatrix} = 0$$

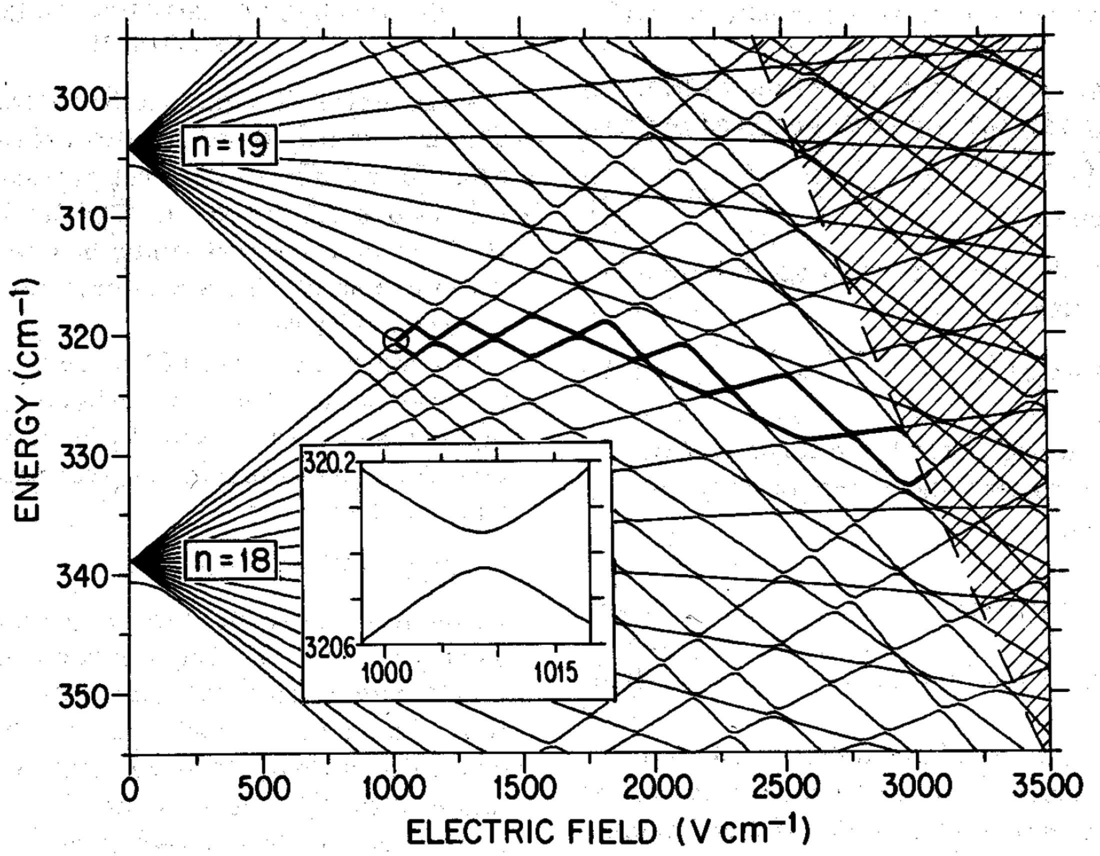
$$E = \frac{1}{2}\left(E_1 + V_{11} + E_2 + V_{22} \pm \sqrt{(E_1 + V_{11} - E_2 - V_{22})^2 + |V_{12}|^2} \right)$$

Собственные значения Эрмитовой матрицы, зависящей от *N* непрерывных действительных параметров, не могут пересекаться нигде, кроме многообразия размерности *N*-2.

Проявление вырождения в спектрах

Пример наблюдения

Dynamical effects at avoiding level crossings:
a study of the Landau-Zener effect Using Rydberg atoms



J.R. Rubbmark, M.M. Kash, M.G. Littman, and D. Kleppner
Phys. Rev. A 23, 3107 (1981).

Проявление вырождения в спектрах

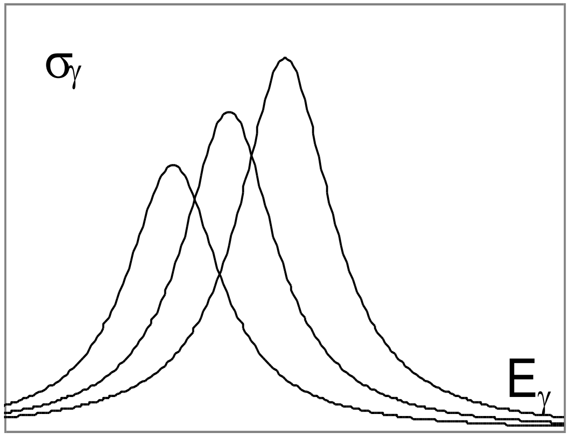
Ядерная физика

H. Feshbach ‘Unified theory of nuclear reaction’ Ann. Of Phys. **5** 357 (1958);
H. Feshbach ’Unified theory of nuclear reaction III: Overlapping resonances’ Ann. Of Phys. **43** 410 (1967).

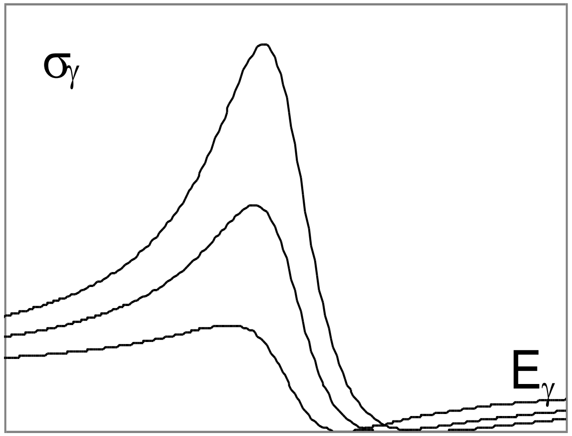
Атомная физика

F. H. Mies ’Configuration Interaction Theory. Effects of overlapping esonance’ Phys. Rev. **175** 164 (1968).

$$ {}^{N}_{Z}A + \gamma \rightarrow {}^{N}_{Z}A^{*} \rightarrow {}^{N-1}_{Z'}A + N $$



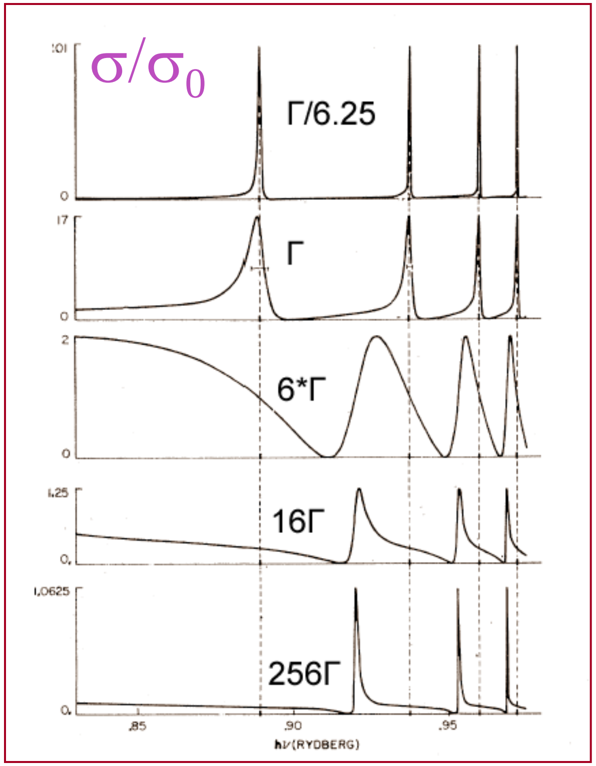
$$ A + \gamma \rightarrow A^{**} \rightarrow A^{+} + e^{-} $$

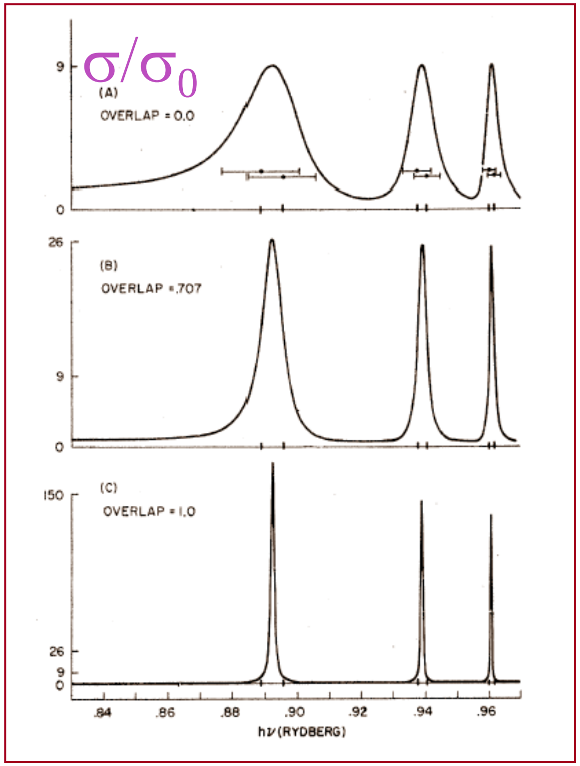


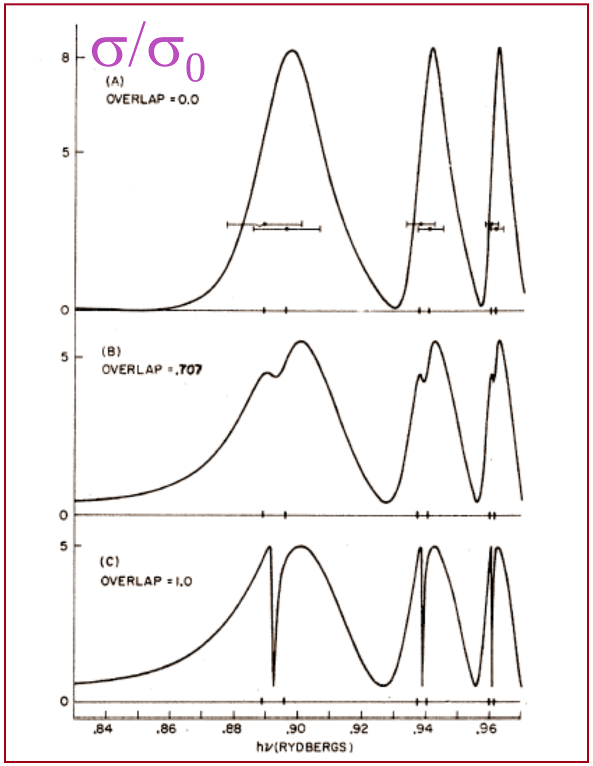
Проявление вырождения в спектрах

Перекрывание состояний двух ридберговских серий в работе F. H. Mies

$$A + e^{-} \leftrightarrow \sum_{n} A(n)^{-} \leftrightarrow A + e^{-}$$







Отношение полного сечения рассеяния к сечению прямого рассеяния