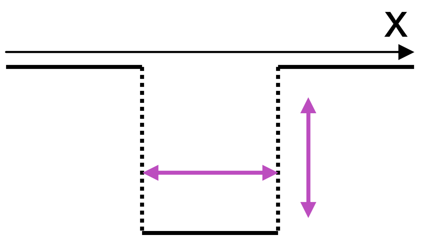
«Разминка»

Одномерная потенциальная яма конечной глубины



- ✓Сколько дискретных уровней в яме?
- ✓Как изменяется число уровней при изменении ширины/глубины ямы?
- ✓Всегда ли есть дискретный уровень?
- ✓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

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

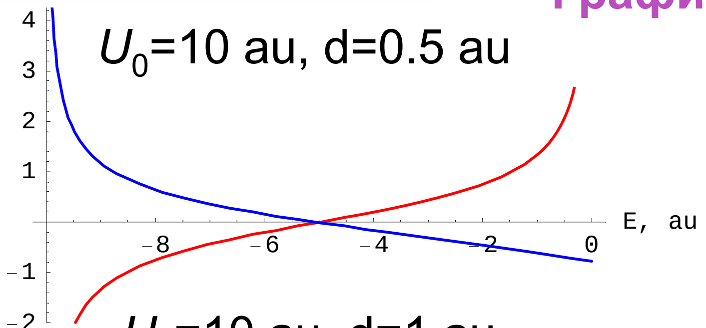
$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x)+V(x)\varphi(x)=E\cdot\varphi(x)$$

$$V(x)=\begin{cases}U, & X_1<x<X_2\\ 0\end{cases}$$

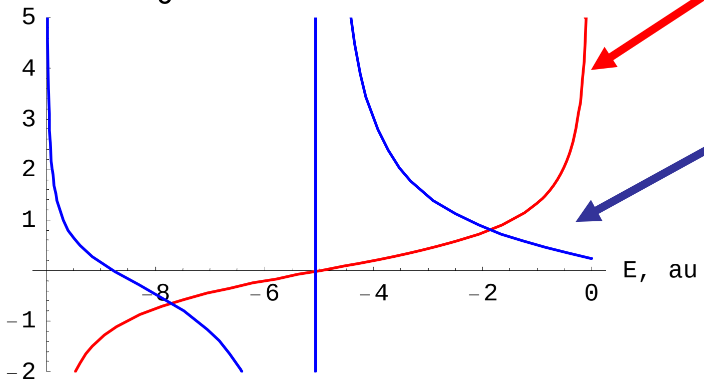
«Разминка»

Графическое решение уравнения на собственные значения для одномерной ямы

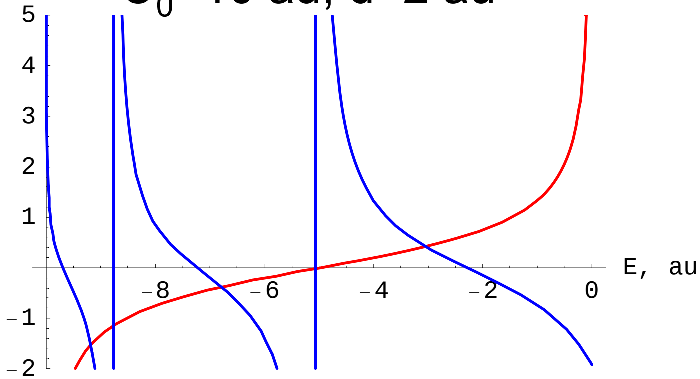
U_0=10 au, d=0.5 au



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

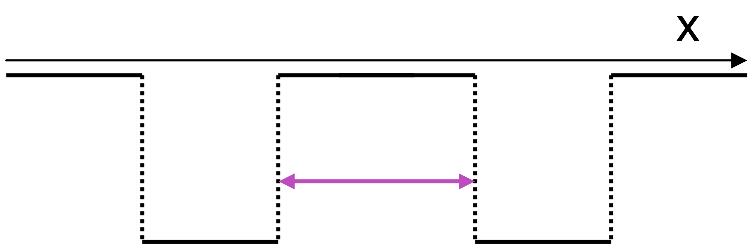
$$ctg(k_2 d) = ctg\left(\sqrt{2(E - U_0)}d\right) \rightarrow \begin{cases} ctg(\sqrt{-2U_0}d), & E \rightarrow 0 \\ \infty, & E \rightarrow U_0 \end{cases}$$

Функция падает до фиксированного значения в нуле

Обязательно есть хотя бы одно решение

«Разминка»

Две одинаковые потенциальные ямы

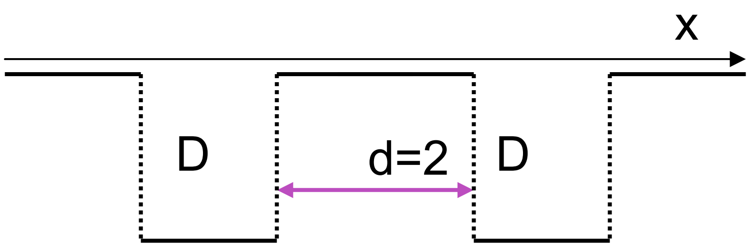


- ✓Сколько дискретных уровней в двух одинаковых ямах?
- ✓Как изменяется число уровней при сближении/удалении ям?
- ✓Где локализована волновая функция частицы?

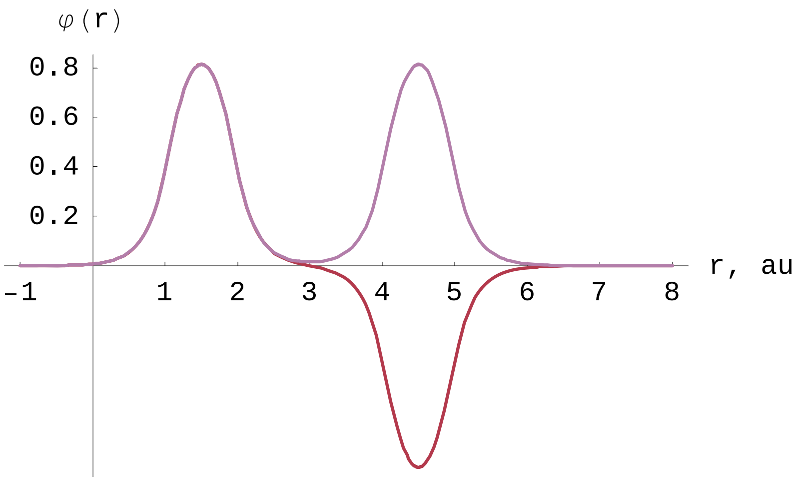
Эффект Ландау-Зинера

«Разминка»

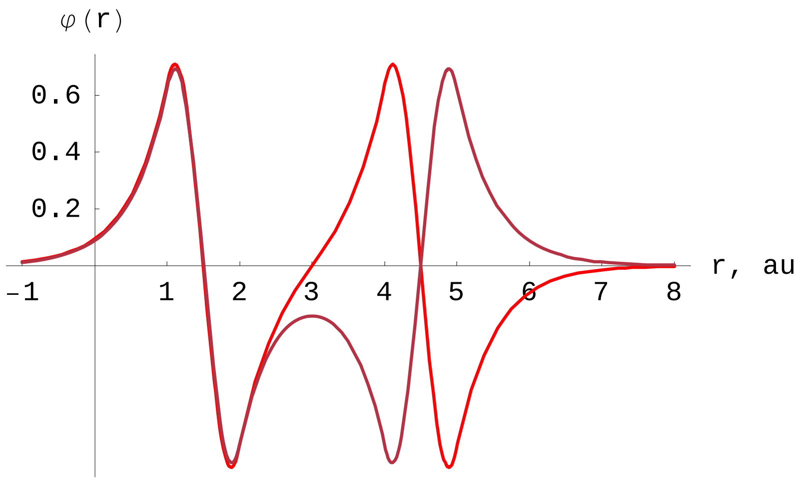
Две одинаковые потенциальные ямы:
U=-10 au, D=1 au, d=2 au



1,2-й уровень



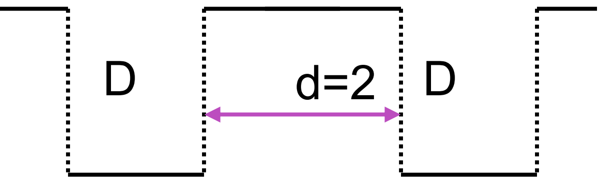
3,4-й уровень



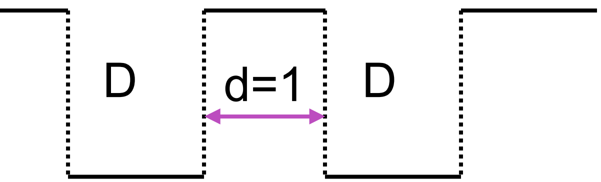
Какая волновая функция соответствует основному состоянию системы?

«Разминка»

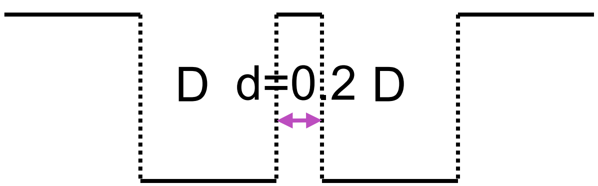
Две одинаковые потенциальные ямы: U=-10 au, D=1 au



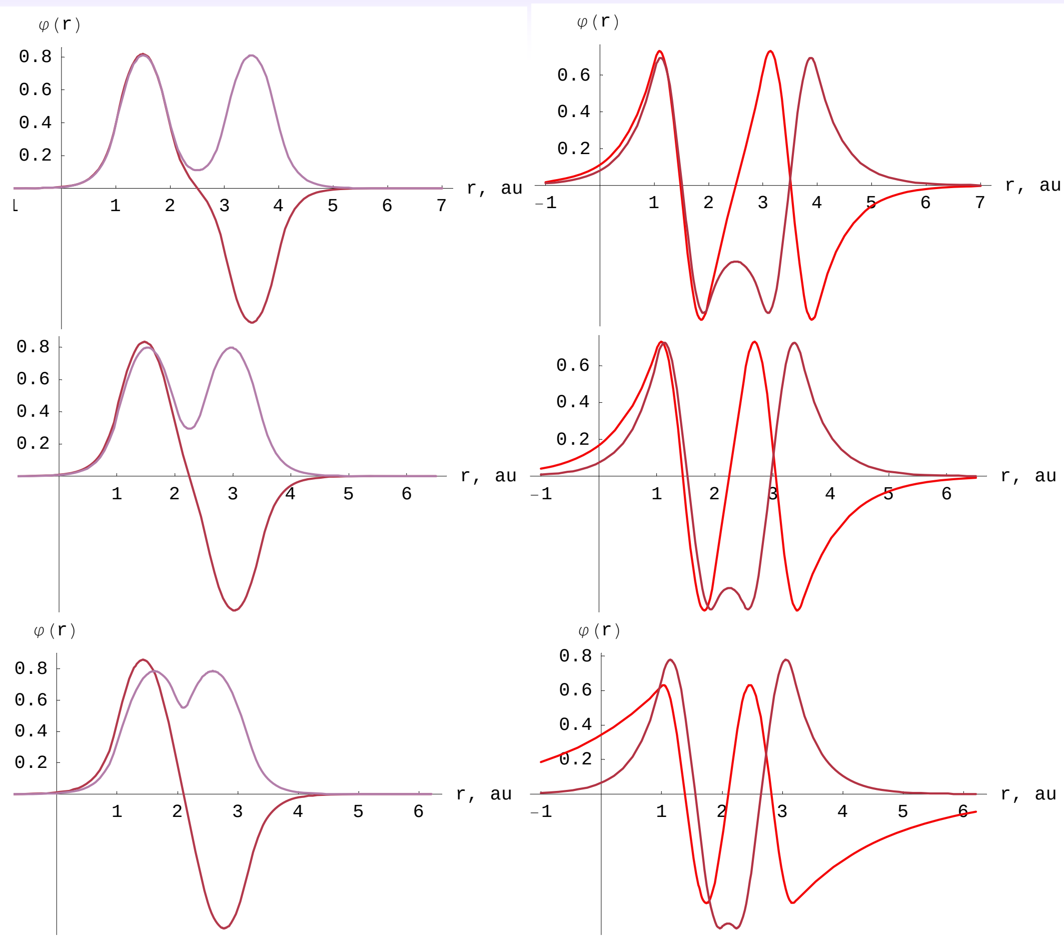
E_1=-7.7055
E_2=-7.7045
E_3=-1.8942
E_4=-1.8290



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



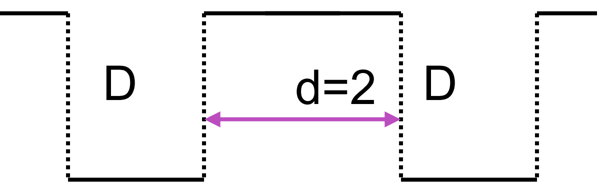
E_1=-8.2904
E_2=-7.2080
E_3=-2.6886
E_4=-0.1824



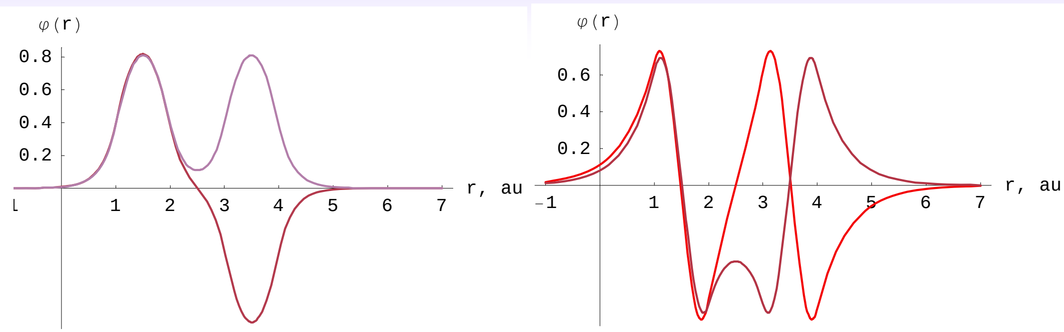
Может ли верхний уровень быть «вытолкнут» из ямы?

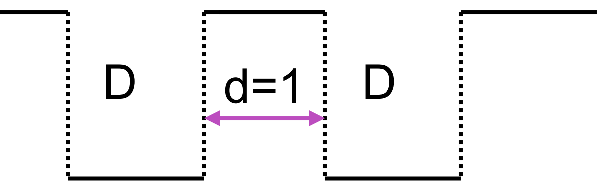
«Разминка»

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

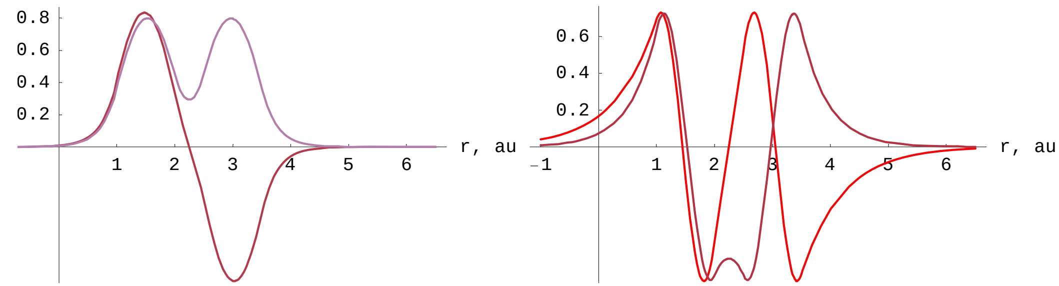


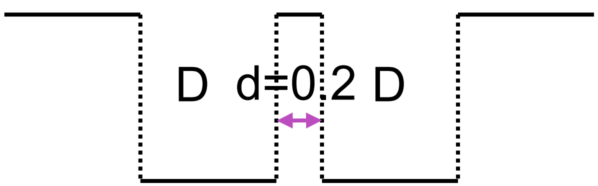
E_1=-7.7055
E_2=-7.7045
E_3=-1.8942
E_4=-1.8290



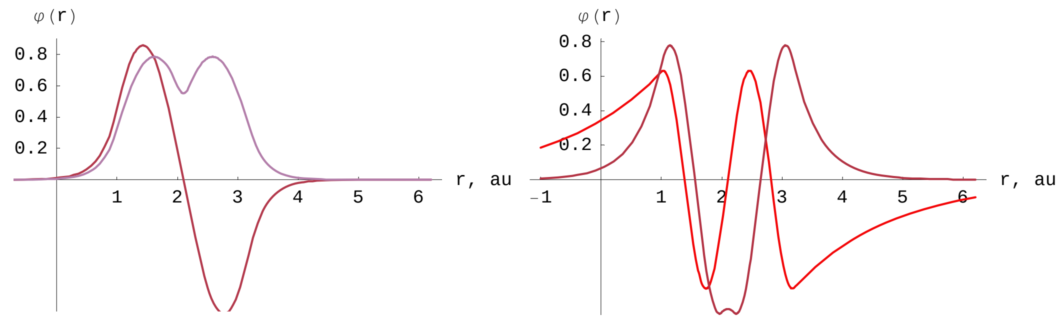


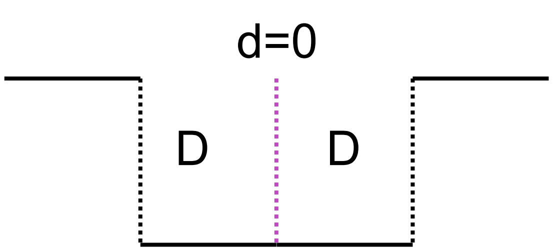
E_1=-7.7285
E_2=-7.6814
E_3=-2.0590
E_4=-1.5929



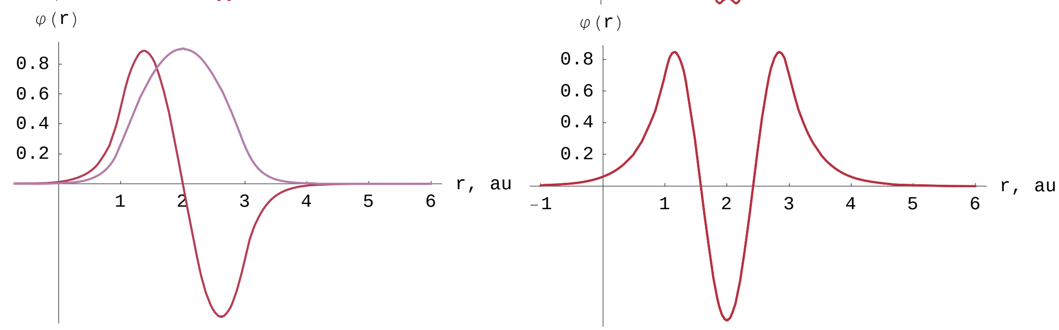


E_1=-8.2904
E_2=-7.2080
E_3=-2.6886
E_4=-0.1824



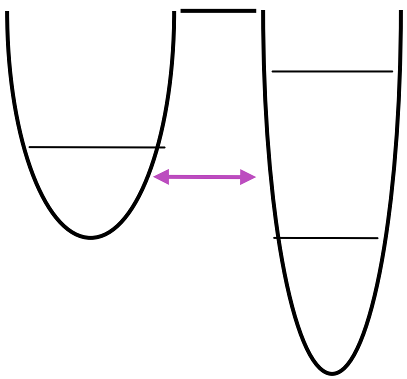


E_1=-9.1803
E_2=-6.7791
E_3=-3.0542



«Разминка»

Эффект Ландау-Зинера



$\hat{H}_0$ - 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: $\psi_0(r) = c_1 \cdot \psi_1(r) + c_1 \cdot \psi_2(r).$

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

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

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

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

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

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

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

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

«Разминка»

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

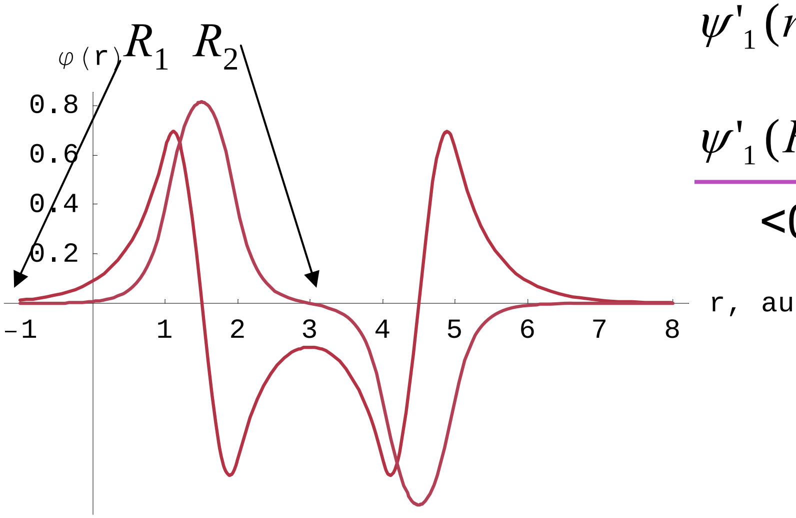
$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi_1(r) + \hat{V}_1(r)\psi_1(r) = 0;$$

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

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

Следствие для решения уравнения Шредингера

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



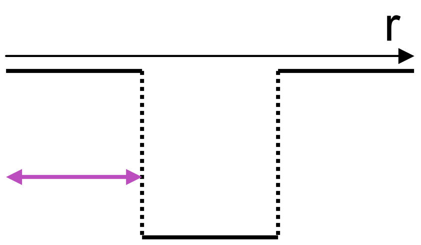
$$\psi'_1(r)\psi_2(r)\Big|_{R_1}^{R_2} = (E_2 - E_1)\int_{R_1}^{R_2} \psi_1(r)\psi_2(r)dr$$

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

Большей энергии дискретного состояния соответствует волновая функция с большим числом узлов

«Разминка»

Сферическая потенциальная яма конечной глубины



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

$$V(r)=\begin{cases}U, & R_1<x<R_2\\ 0\end{cases}$$

$$\varphi(\vec{r})=\tilde{\varphi}(r)Y_{lm}(\vec{r}/r)$$

$$\psi(r)=r\cdot\tilde{\varphi}(r)$$

✓Сколько дискретных уровней в яме?
✓Как изменяется число уровней при удалении ямы от начала координат (центра симметрии)?

Исключаем угловые переменные

$$-\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2\cdot\partial}{r\cdot\partial r}\right)\tilde{\varphi}(r)+V(r)\tilde{\varphi}(r)+\frac{l(l+1)}{2\cdot r^2}\tilde{\varphi}(r)=E\cdot\tilde{\varphi}(r)$$

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi(r)+V(\vec{r})\cdot\psi(r)+\frac{l(l+1)}{2\cdot r}\psi(r)=E\cdot\psi(r)$$

Уравнение совпадает с одномерным случаем. Совпадает ли спектр?

s-состояние

$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi(r)+V(\vec{r})\cdot\psi(r)=E\cdot\psi(r)$$