ВОЛНЫ СВЕТА И ВЕЩЕСТВА

Е.В. Грызлова

НИИЯФ МГУ

Осенний семестр 2013 г.

1. **«Разминка»:**
   а) Квантование одномерной потенциальной ямы: число стационарных состояний.
   б) изменение спектра при изменении формы.
   в) сближение двух ям, вырождение уровней.
   г) Эффект Ландау-Зинера
   д) Число узлов дискретных состояний

2. **Плоская волна и понятие волнового пакета – волны вещества.**

3. **Системы со сферической симметрией.**

4. **Начала теории рассеяния.**

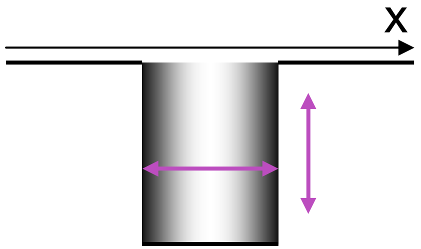
5. **Резонансной рассеяния и вопрос о двойных полюсах матрицы рассеяния.**

6. **Двухуровневая система, связь лазерным полем.**

7. **Изучение антипротония.**

8. **Нобелевская премия по физике 2012 года. Изучение одиночной квантовой системы.**

«Разминка»



Одномерная потенциальная яма конечной глубины

✓Конечно ли число 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

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

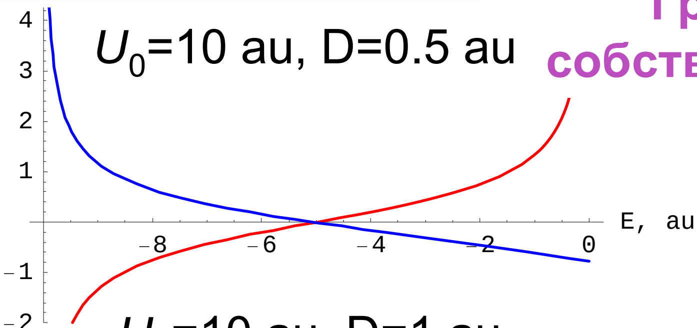
$$-\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\varphi(x)+V(x)\varphi(x)=E\cdot\varphi(x)$$

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

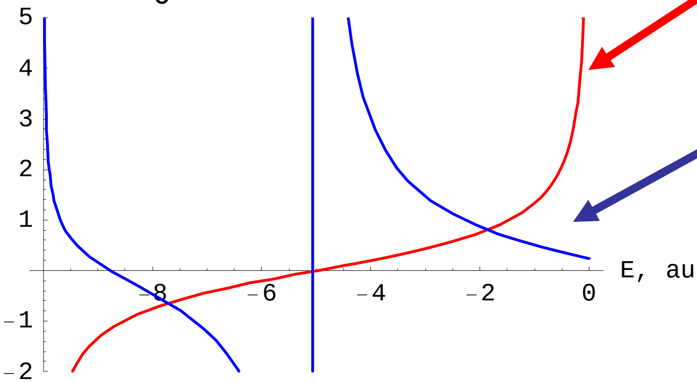
«Разминка»

Графическое решение уравнения на собственные значения для одномерной ямы

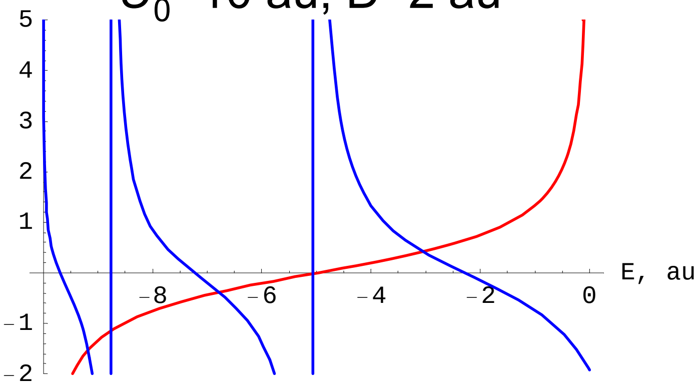
U_0=10 au, D=0.5 au



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

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

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

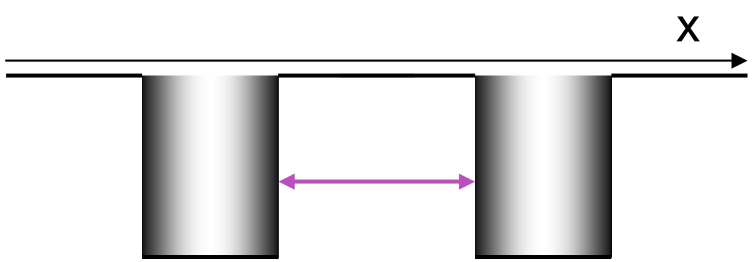
Функция монотонно растет в области определения

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

Функция падает до фиксированного значения в нуле

Обязательно есть хотя бы одно решение

«Разминка»



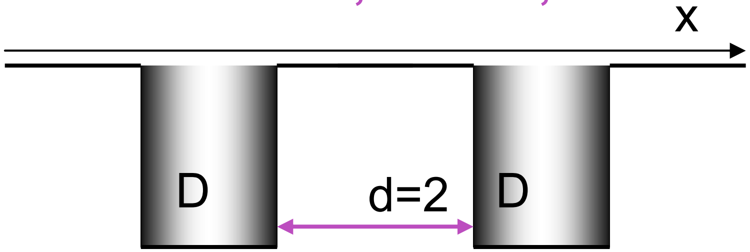
Две одинаковые потенциальные ямы

✓Сколько дискретных уровней в яме?
✓Как изменяется число уровней при сближении/удалении ям?
✓Всегда ли есть дискретный уровень?
✓Где локализована волновая функция частицы, есть ли вероятность обнаружить частицу вне ямы?

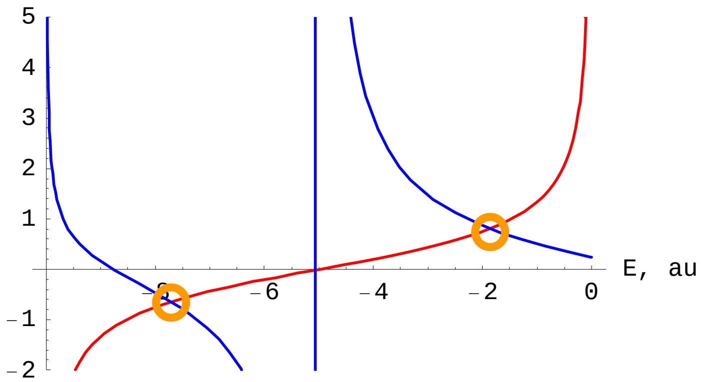
✓Теорема о числе узлов волновой функции дискретного состояния
✓Эффект Ландау-Зинера

«Разминка»

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

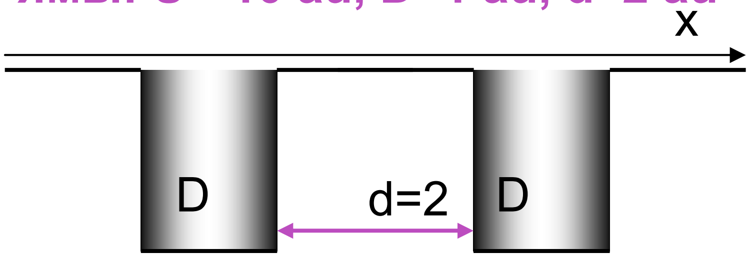


U_0=10 au, D=1 au

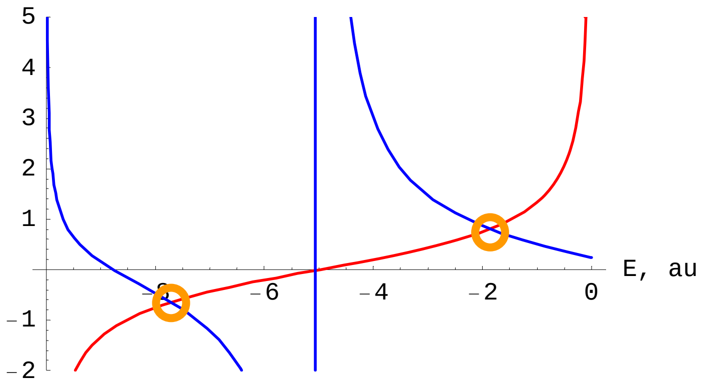


«Разминка»

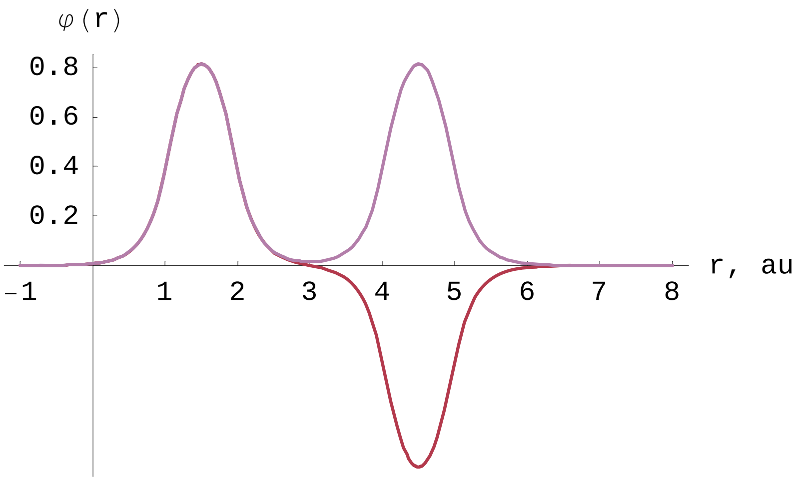
Две одинаковые потенциальные ямы: U=-10 au, D=1 au, d=2 au



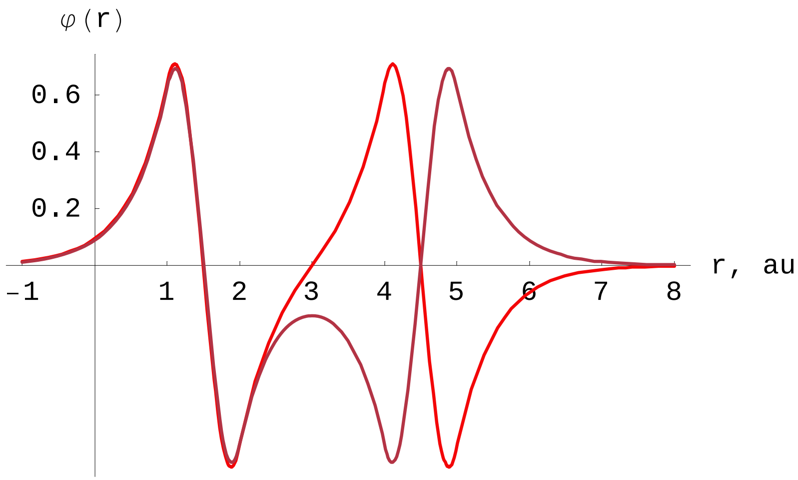
U_0=10 au, D=1 au



1,2-й уровень

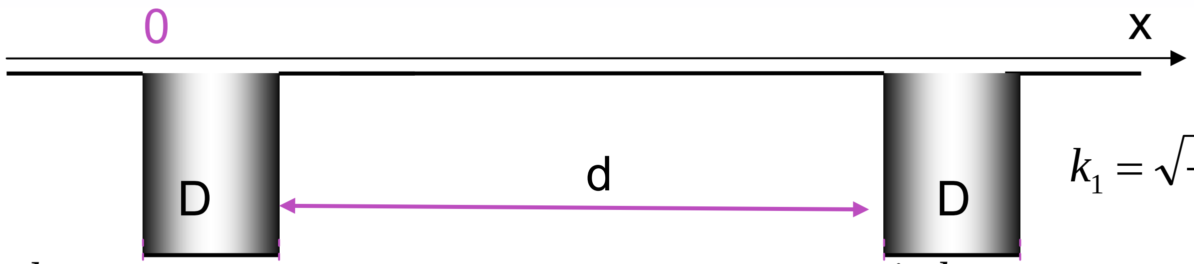


3,4-й уровень



Какая волновая функция соответствует основному состоянию системы?

«Разминка»



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

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

$$a_1 = a_2;$$
$$k_1 a_1 = k_2 b_2;$$

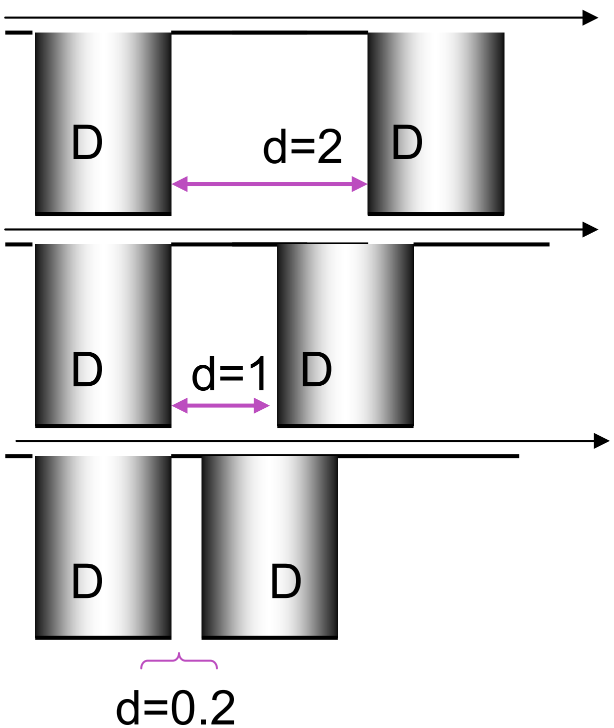
$$a_2 \cos\left(k_2 D\right) + b_2 \sin\left(k_2 D\right) = a_3 \exp\left(k_1 D\right) + b_3 \exp\left(-k_1 D\right);$$
$$-a_2 k_2 \sin\left(k_2 D\right) + b_2 k_2 \cos\left(k_2 D\right) = a_3 k_1 \exp\left(k_1 D\right) - b_3 k_1 \exp\left(-k_1 D\right);$$

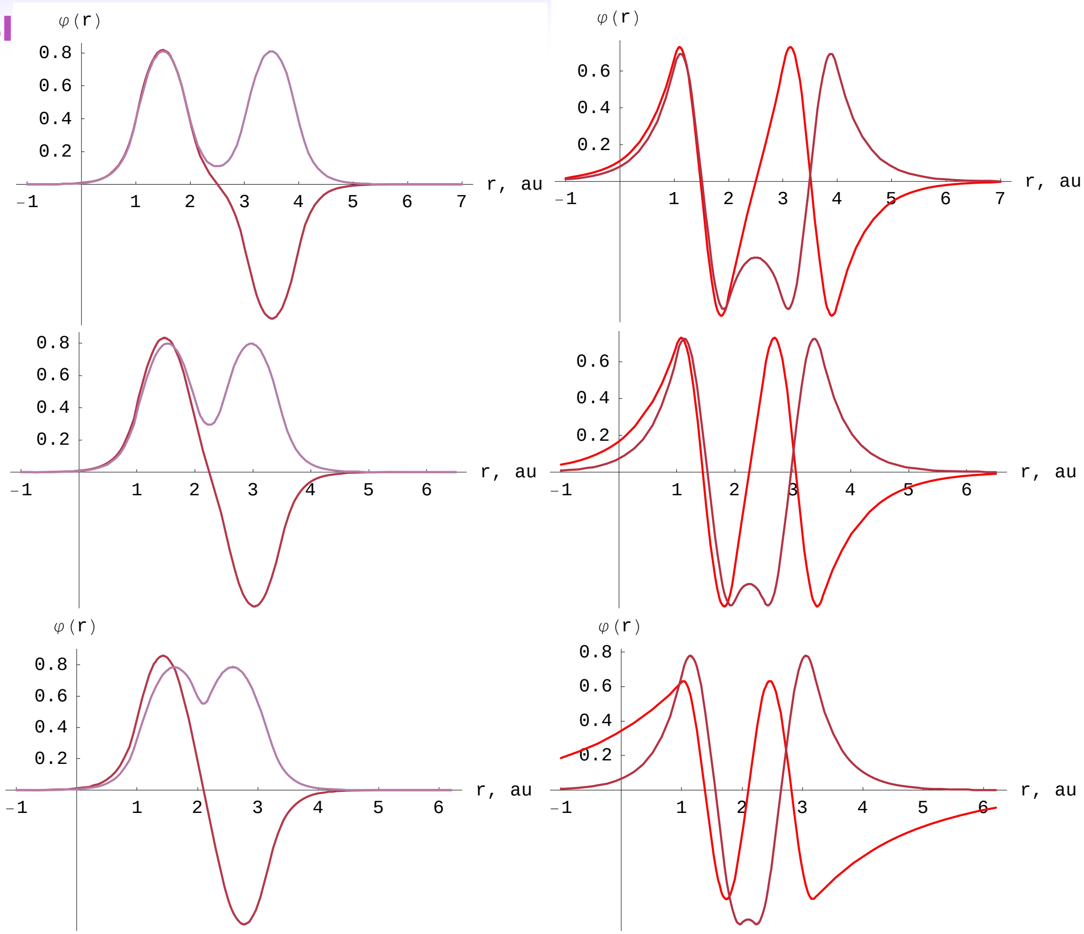
$$a_3 \exp\left(k_1[D+d]\right) + b_3 \exp\left(-k_1[D+d]\right) = a_4 \cos\left(k_2[D+d]\right) + b_4 \sin\left(k_2[D+d]\right);$$
$$a_3 k_1 \exp\left(k_1[D+d]\right) - b_3 k_1 \exp\left(-k_1[D+d]\right) = -a_4 k_2 \sin\left(k_2[D+d]\right) + b_4 k_2 \cos\left(k_2[D+d]\right);$$

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

«Разминка»

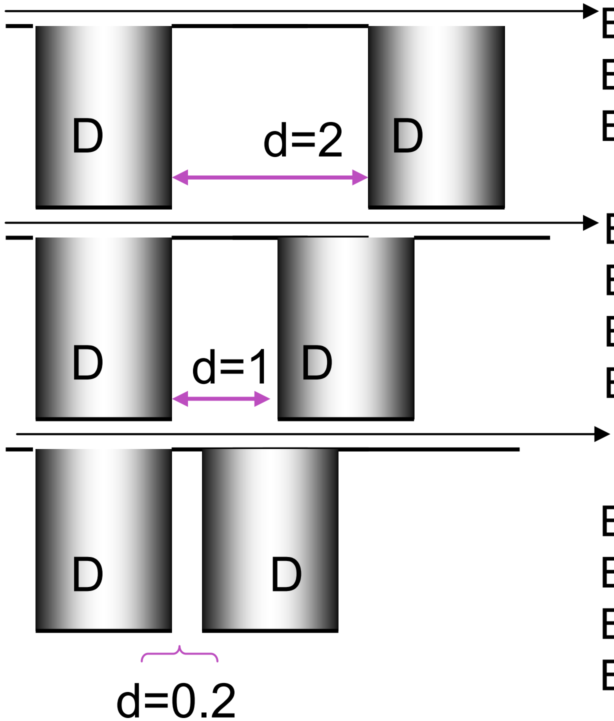
Две одинаковые потенциальны ямы: U=-10 au, D=1 au





«Разминка»

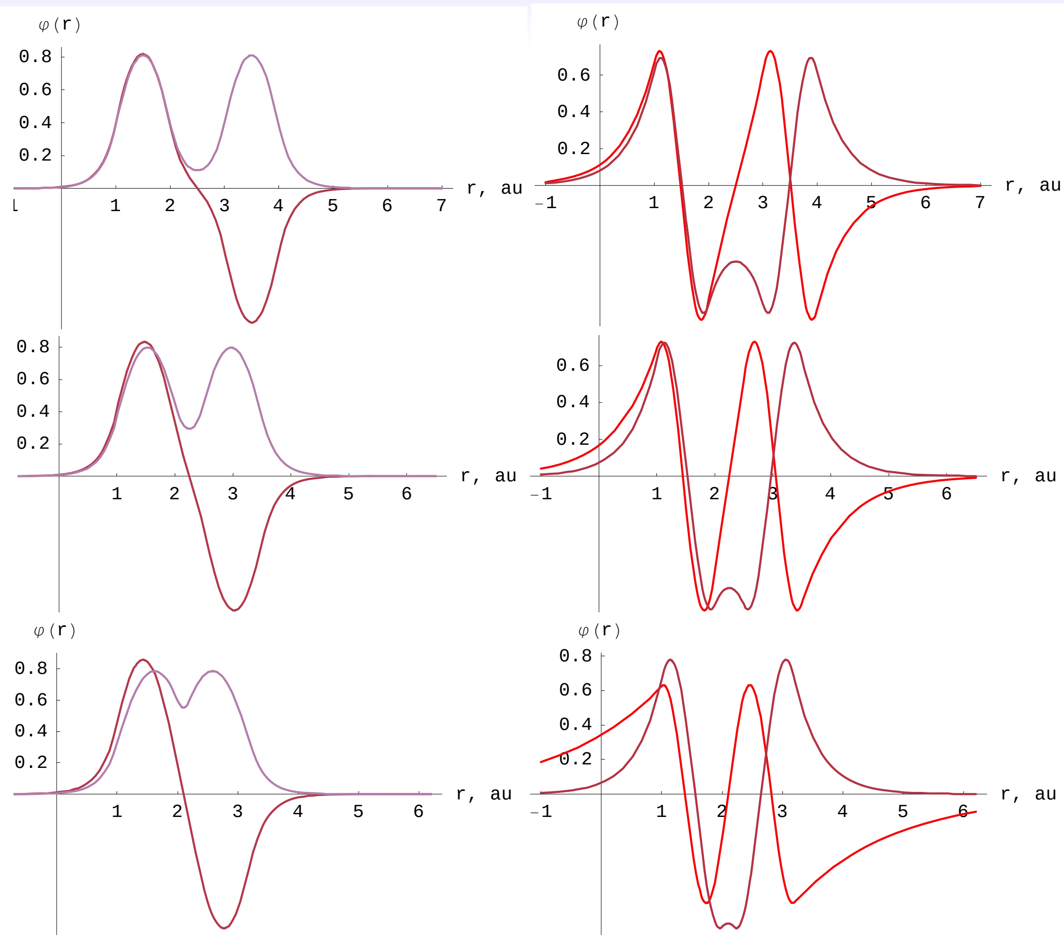
Две одинаковые потенциальные ямы: U=-10 au, D=1 au



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

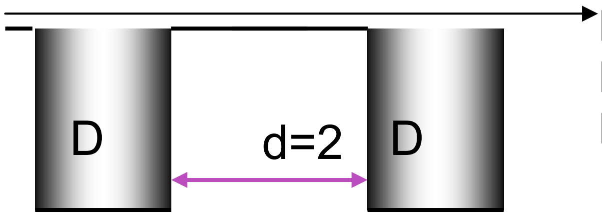
E_1=-8.2904
E_2=-7.2080
E_3=-2.6886
E_4=-0.1824



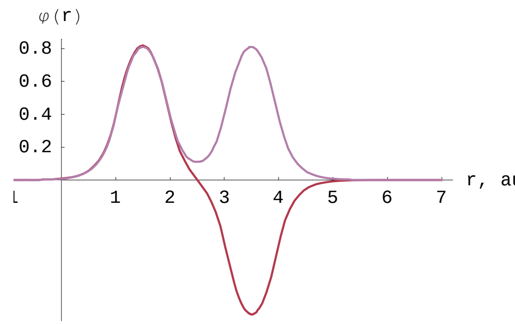
Может ли верхний уровень быть «вытолкнут» из ямы?

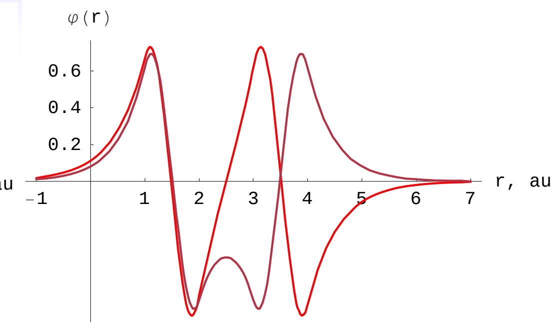
«Разминка»

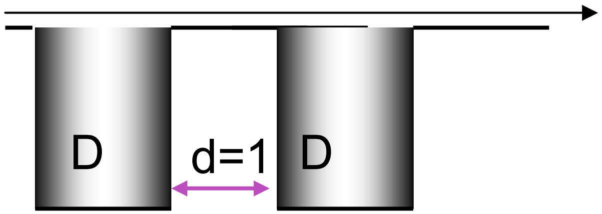
Две одинаковые потенциальные ямы: U=-10 au, D=1 au



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

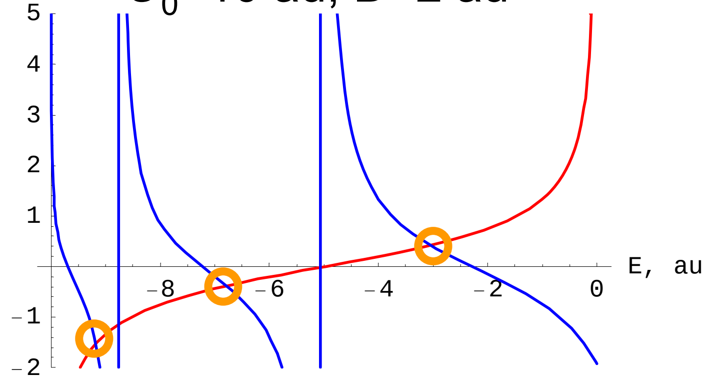


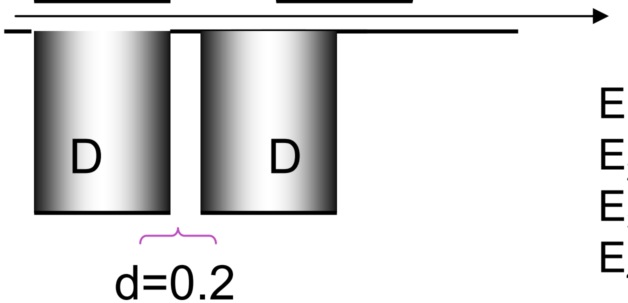




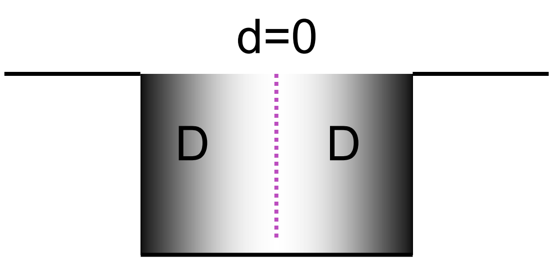
E_1=-7.7285
E_2=-7.6814
E_3=-2.0590
E_4=-1.5929

U_0=10 au, D=2 au

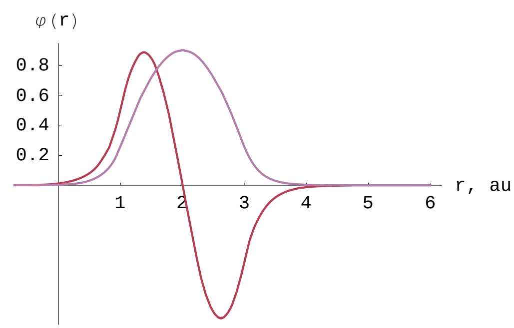


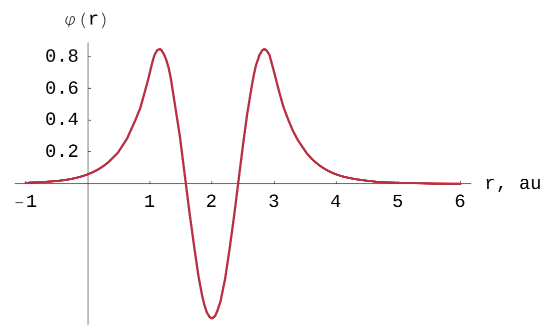


E_1=-8.2904
E_2=-7.2080
E_3=-2.6886
E_4=-0.1824



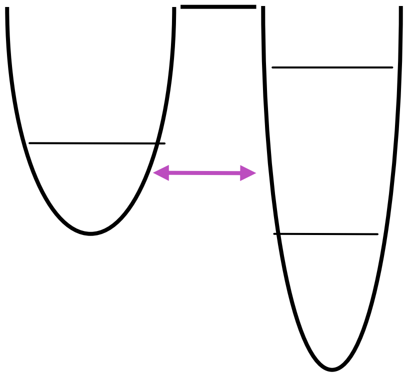
E_1=-9.1803
E_2=-6.7791
E_3=-3.0542





«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: $\psi_0(r) = c_1 \cdot \psi_1(r) + c_2 \cdot \psi_2(r).$

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

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

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

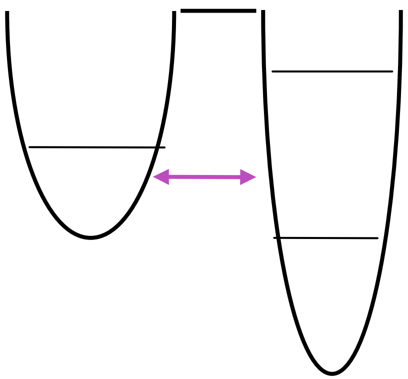
$$c_1 V_{21} + c_2(E_2 + V_{22} - E) = 0$$

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

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

«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: $\psi_0(r) = c_1 \cdot \psi_1(r) + c_2 \cdot \psi_2(r).$

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

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

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

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

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

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

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

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

«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

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

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

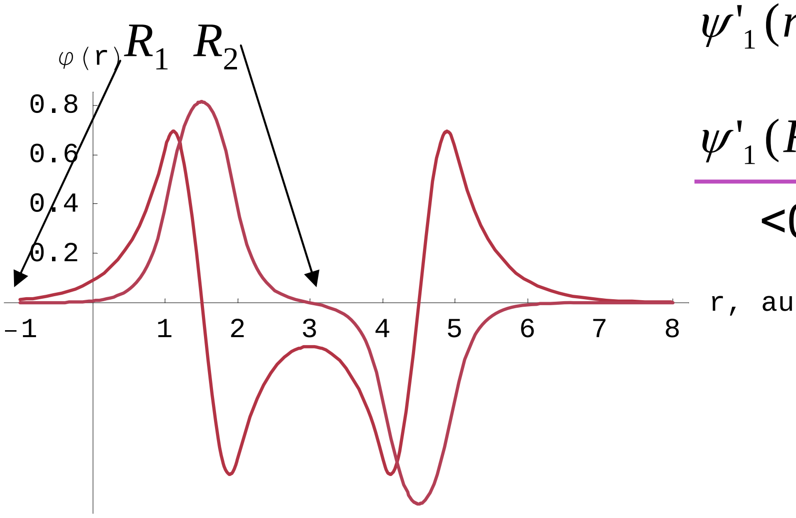
$$\boxed{W(\psi_1,\psi_2)\Big|_{R_1}^{R_2} = \int_{R_1}^{R_2}(\hat{V}_1(r) - \hat{V}_2(r))\psi_1(r)\psi_2(r)dr}$$

Следствие для решения уравнения Шредингера

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

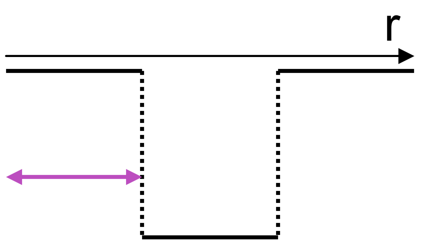
$$\psi'_1(r)\psi_2(r)\Big|_{R_1}^{R_2} = (E_2 - E_1)\int_{R_1}^{R_2}\psi_1(r)\psi_2(r)dr$$

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



Большей энергии дискретного состояния соответствует волновая функция с большим числом узлов

«Разминка»



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

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

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

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

Сферическая потенциальная яма конечной глубины

- ✓Сколько дискретных уровней в яме?
- ✓Как изменяется число уровней при удалении ямы от начала координат (центра симметрии)?
- ✓Всегда ли есть дискретный уровень?
- ✓Где локализована волновая функция частицы?

Исключаем угловые переменные

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

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

s-состояние

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

Уравнение совпадает с одномерным случаем. Совпадает ли спектр?