

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

Физический факультет
Кафедра теоретической физики

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ПРАКТИКУМ ПО КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ
(учебное пособие)

Г.Л.Коткин

Новосибирск 2012

Аннотация.

В НГУ много лет работает компьютерный практикум по квантовой механике. Этот практикум является уникальным и весьма полезным. Однако для эффективной его работы требовалось участие разработчиков задач и программ. Сейчас созданы программы, которые делают возможным „отделить“ использование программ от разработчиков и полностью передать проведение работ практикума преподавателям– физикам. Это пособие и предназначено для того, чтобы нашими программами могли воспользоваться как в НГУ, так и в других учебных заведениях. Более того, студент, получивший в свои руки компьютерные программы и данное руководство, получает возможность выполнять задания-исследования самостоятельно. Лектор сможет демонстрировать подобранные им заранее иллюстрации и зависимости, сохраняя возможность при вопросах слушателей модифицировать данные задач. Охват тем, осваиваемых за то же самое время, может заметно возрасти.

Содержание

1	Введение	5
2	Как компьютер решает задачи	7
2.1	Уравнение Шредингера	7
2.2	Кратность вырождения уровня энергии	8
2.3	Безразмерные переменные	8
2.4	Решения уравнения Шредингера при постоянном потенциале $U(x)$ и при кусочно-постоянном $U(x)$	9
2.5	Поиск связанных состояний в поле $U(x)$	9
2.6	Распределение по импульсам	11
2.7	Зависимость волновой функции от времени	11
2.8	Коэффициент прохождения	12
2.9	Состояния в периодическом поле	12
3	Как работать с программой	14
3.1	Быстрый старт	14
3.2	Потенциал и уровни энергии	14
3.3	Изменение энергии	15
3.4	Изменение потенциала мышкой	15
3.5	Числовое задание потенциала	15
3.6	Усложнение потенциала мышкой	16
3.7	Контекстное меню	16
3.8	Координатные распределения	16
3.9	„Виляние хвостиком“	16
3.10	Изменение масштабов стрелками	17
3.11	Отмена изображения уровневых функций	17
3.12	Вопросы: Координатные распределения	17
3.13	Вопросы: Координатные распределения и число нулей $\psi_n(x)$	17
3.14	Вопросы: Координатные распределения и коэффициент прохождения $T(E)$	17
3.15	Импульсные распределения	18
3.16	Вопросы: Координатные и импульсные распределения	18
3.17	Временная эволюция волнового пакета	18
3.18	Задания: волновой пакет	18
3.19	Автоматическая деформация потенциала	19
3.20	Периодический потенциал и края зон	19
3.21	Распределения по x и k в периодическом потенциале	20
3.22	Закон дисперсии	20
3.23	Задачи к периодическому потенциалу	20
3.24	Деформация зонного спектра	21
3.25	Квазистационарные состояния	21
3.26	Методы поиска нулей на комплексной плоскости	22
3.27	Контуры Брейта-Вигнера	23
3.28	Зависимость от времени квазистационарных состояний	23
3.29	Квазистационарные состояния в особых случаях	23
3.30	Запись и чтение файлов	24

4	О заданиях	24
4.1	Цель практикума	24
4.2	Тип задач	24
4.3	Характер работы	25
5	Свободное движение	25
5.1	Стационарные Ψ -функции	25
5.2	Волновой пакет	26
6	Потенциальная ступень	26
6.1	Стационарное рассеяние частицы ступенью	26
6.2	Столкновение волнового пакета с резкой ступенью	26
6.3	Размытая ступень	26
7	Имитация дельта-функциональной ямы/барьера	27
7.1	Уровень в мелкой яме	27
7.2	Коэффициент прохождения в случае мелкой ямы	27
7.3	Дельта-яма в потенциальной ступеньке	27
8	Широкие яма/барьер	27
8.1	Прямоугольная яма с несколькими уровнями	27
8.2	Ход уровней при расширении прямоугольной ямы	28
8.3	Виртуальные уровни	28
8.4	Надбарьерные резонансы	28
8.5	Волновой пакет в широкой прямоугольной яме: колебания на начальной стадии	28
8.6	Расплывание и возрождение волнового пакета в широкой прямоугольной яме	29
8.7	Модель осцилляторной ямы	29
8.8	Модель треугольной (трапецевидной) ямы	29
8.9	Плавный барьер	29
8.10	Модель безотражательного потенциала	29
9	Пара ям–модель двухатомной молекулы	30
9.1	Пара одинаковых ям–модель ковалентной связи	30
9.2	Импульсное распределение в двух ямах	30
9.3	Однопараметрическое изменение симметричной пары ям	30
9.4	Осцилляции во времени	31
9.5	Пара разных ям– модель ионной связи в двухатомной молекуле	31
10	Несколько ям–модель «кристалла»	31
10.1	Несколько одинаковых ям	31
10.2	Переход от непрерывного к зонному спектру	32
10.3	Таммовский уровень	32
10.4	Модель примесной ямы в длинной молекуле	32
10.5	Штарковская лестница	32
10.6	Блоховские осцилляции	32

11 Квазиуровни	33
11.1 Пара барьеров	33
11.2 Три барьера	33
11.3 Несколько барьеров	33
12 Зоны для нескольких ям при положительных энергиях	33
13 Квазистационарные состояния	33
13.1 Пара барьеров	33
13.2 Несколько барьеров	34
13.3 Квазистационарные состояния для ямы/барьера	34
13.4 Квазистационарные состояния для "безотражательной" ямы	34
14 Периодический потенциал	34
14.1 Одна яма на периоде	34
14.2 Несколько ям на периоде	35

Программа **kvant** с необходимыми для её работы добавками содержится в отдельном файле (директории) **programs**.

Есть также „заготовки“, ориентированные на работу в осеннем семестре 2012г. и их описание (в файле **заготовки**). Набор таких заготовок может быть расширен в зависимости от программы курса.

Компьютерный практикум по квантовой механике работает в НГУ много лет. За это время многие преподаватели и студенты оценили его пользу и внесли в набор задач и вопросов много дополнений. Особенно полезным в этом отношении было влияние В.Г.Сербо, который призывал увлекающихся авторов ограничиваться задачами, доступными для тех, кому они предназначены. Основную роль в разработке программ играли О.А.Ткаченко, В.А.Ткаченко и Д.Г.Бакшеев.

В intrnet программа названа QUANTX, как и называлась одна из её первых версий, использовавшая операционную систему DOS. Последняя версия названа kvant, чтобы не было путаницы. Описанию работы с этой версией программы и посвящено данное пособие. Предполагается, что эта версия будет работать с разными популярными современными операционными системами.

1 Введение

Для активного освоения квантовой механики необходимо решение множества задач. Один из ее создателей, П. А. М. Дирак писал: „Новые теории, независимо от их математической формы, построены на основе таких физических понятий, которые не могут быть объяснены с помощью известных ранее понятий... Подобно тем основным категориям (например, понятия смежности, тождества), которыми каждый человек должен овладеть с рождения, новые физические понятия можно освоить лишь при продолжительном знакомстве с их свойствами и их употреблением.“

Курс квантовой механики по отношению к возможности его компьютерной „поддержки“ оказался в счастливом положении, потому что множество различных задач могут быть решены с помощью одного лишь уравнения — уравнения Шредингера. А поскольку в этой области физики надо „заново учиться ходить“, уже одномерные задачи дают для этого богатый материал.

Стиль работы в компьютерном практикуме не похож ни на тот, который принят на семинарах, ни на работу программиста. Здесь можно полностью исключить громоздкие вычисления и сосредоточить внимание на постановке задачи и анализе результатов. Если принять для самой грубой оценки, что эта часть работы над задачей занимает половину времени, то получается, что компьютер ускоряет темп работы примерно вдвое. Впрочем, не менее важно, что доступны становятся новые задачи.

Для кого-то будет нетривиальным замечание, что работа в этом практикуме предполагает, в первую очередь, **не количественное решение задач, а качественное изучение закономерностей.**

Программа QUANT “удлиняет руки”, но не содержит в себе готового путеводителя по квантовой механике! Кое-что (и немало!) есть в этом пособии, но учиться человек сам. Предполагается, что **на занятие в компьютерном классе студент приходит, заранее зная, какие вопросы собирается исследовать.** Эти вопросы заранее обсуждаются с преподавателем, который ведет в группе семинары, как правило, результаты, полученные в терминальном классе, тоже обсуждаются с ним же (обычно тут же, рядом с компьютером).

Каких-то формальных отчетов о работе в практикуме обычно не требуется. Все вопросы обсуждаются непосредственно во время решения конкретных задач, или, лучше сказать, во время выполнения конкретных заданий. Естественный результат работы — умение представить вообще без вычислений и без компьютера вид интересующих нас зависимостей (не тех, которые наблюдали, а каких-то иных, лишь отдаленно похожих).

Перечислим кратко, какие задачи решает программа QUANTX. Программа имеет дело с кусочно-постоянными одномерными потенциалами. Она находит уровни энергии в заданных полях и соответствующие волновые функции, а также — распределения по импульсам. Определяются суперпозиции связанных состояний и зависимости волновых функций от времени. Можно задавать широкие виды деформации потенциалов и следить, как при этом изменяются уровни энергии. Определяется коэффициент прохождения в заданном поле, изображаются волновые функции в этой задаче. Суперпозиции состояний с энергиями непрерывного спектра (приблизенно) представляют движение волновых пакетов. Определяется задержка по времени при отражении пакета. В периодическом поле находятся разрешенные и запрещенные зоны, закон дисперсии, изображаются волновые функции, распределение по импульсам, демонстрируется изменение зон при изменении поля.

Не так уж сложно привести работу программ к сбою, происходящему вследствие выхода за рамки допустимого диапазона чисел (± 38 порядков). Контроль, предупреждающий о возможности такого сбоя, в программах не предусмотрен.

Необходимо также напомнить о возможности возникновения артефактов — явлений, связанных со способом наблюдения. Они возникают, например, если выводить на экран синусоиду, длина волны которой близка или меньше, чем расстояние между точками растра.

Обоих этих сортов неудобств легко избежать, выбирая достаточно „умеренные“ значения параметров.

Предлагается также набор „заготовок“ — файлов, содержащих удобно выбранные наборы параметров, отвечающих той или иной из физических задач. Эти наборы па-

раметров могут быть вызваны и автоматически введены в исполняемую программу. Тем самым студент получает возможность ознакомиться с введением в поставленную задачу без затруднений. Разумеется, далее можно модифицировать параметры, а при желании и записать их автоматически в создаваемый тут же файл, чтобы впоследствии можно было воспроизвести показавшуюся интересной ситуацию. Легко создаются при таком подходе и лекционные демонстрации — при наличии большого экрана или на многих персональных компьютерах.

Пусть, например, мы рассматриваем состояния частицы в прямоугольной потенциальной яме. Такое поле есть в числе заготовок. (Конечно, такая задача в какой-то мере доступна и для исследования на доске.) На экране мы увидим и зависимость $U(x)$, и уровни энергии в таком потенциале, и зависимости $\psi(x)$ и $|\psi(x)|^2$ на выбор (в другом окне, размещённом согласованно с первым), причём окажутся удачно подобраны масштабы. Далее с помощью „мышки“ можно будет изменять ширину и глубину ямы и наблюдать, как при этом появляются или исчезают связанные состояния. Доступны и численные значения уровней энергии (в специально обусловленном масштабе).

Можно получить распределения по импульсам для каждого из состояний. (Заметим, что на подобное вычисление со студентами на доске или в тетрадях для ямы конечной глубины едва ли отважится разумный преподаватель.) Однако качественное обсуждение вида распределения по импульсам — положения пиков, их ширины, особенностей распределения по импульсам для основного состояния и состояния с энергией, близкой к нулю — задача для студента, начинающего знакомство с квантовой механикой, вполне достойная. Какие-то свойства этого распределения студент может предсказать, а потом проверить своё предсказание, что-то — объяснить, увидев...

Несложно далее, например, задать пару потенциальных ям, скажем, одинаковых и наблюдать, как изменяются волновые функции и уровни энергии в зависимости от расстояния между этими ямами. Можно изменить глубину одной из ям и наблюдать, как волновые функции „локализуются“ в различных ямах.

Пояснять, что в этих случаях мы имеем дело с самыми простыми моделями ковалентной связи в молекуле, с расщеплением уровней в молекуле аммиака и т.п., остаётся на долю преподавателя.

Имея в руках такую программу, студент может проводить различные самостоятельные исследования.

2 Как компьютер решает задачи

2.1 Уравнение Шредингера

Волновая функция частицы удовлетворяет уравнению Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + U(r)\Psi. \quad (1)$$

Мы будем поначалу рассматривать только одномерные задачи, т.е. примем, что $U = U(x)$, $\Psi = \Psi(x, t)$, причем чаще всего будем интересоваться *стационарными* состояниями, для которых

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}, \quad (2)$$

а уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0. \quad (3)$$

2.2 Кратность вырождения уровня энергии

Уравнение (3) при заданном значении энергии E может иметь два линейно независимых решения. Однако при некоторых постановках задачи оказывается допустимо только одно из них (или ни одного). Для анализа в этом случае полезен тот факт, что *вронскиан*, построенный из двух решений уравнения (3), является постоянной¹:

$$W(x) = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x) = \text{const.} \quad (4)$$

Если мы хотим найти *связанное состояние*, локализованное в *потенциальной яме* или вблизи неё, то нужно потребовать, чтобы волновая функция стремилась к нулю при удалении от области ямы. Тогда $W = 0$ и из (4) легко получить, что $\psi_1(x)$ и $\psi_2(x)$ могут отличаться друг от друга только постоянным множителем. Требование $\psi(x) \rightarrow 0$ при удалении в другую сторону может выполняться только при отдельных (*дискретных*) значениях E .

При отражении от достаточно высокого барьера состояние с заданной энергией также оказывается невырожденным.

Если же речь пойдёт об отражении частицы с энергией, большей значений потенциальной энергии на бесконечно удалённых расстояниях, то $W \neq 0$ и значение энергии оказывается двукратно вырожденным.

2.3 Безразмерные переменные

Прежде всего „обезразмерим“ это уравнение. Для этого выберем какую-то единицу длины a_0 . Для задач, касающихся свойств атомов и молекул, естественно принять за единицу длины, например, боровский радиус ($a_0 = 5 \cdot 10^{-9}$ см). Для задач, относящихся к строению атомного ядра, удобная единица длины на пять порядков меньше, $a_0 = 1$ фм = 10^{-13} см. В качестве единицы энергии выберем²

$$\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2ma_0^2}. \quad (5)$$

Для явлений в атомных масштабах обычно речь идет о движении электрона, если m — масса электрона, то $\varepsilon_0 = 13,6$ эВ. В „ядерных“ задачах естественно принять m равным массе нуклона. Тогда $\varepsilon_0 \approx 20$ МэВ. Теперь можно ввести безразмерные переменные

$$\tilde{x} = x/a_0; \quad \tilde{U} = U/\varepsilon_0; \quad \tilde{E} = E/\varepsilon_0; \quad \tilde{\psi} = \psi/\sqrt{a_0}. \quad (6)$$

Переход к функции $\tilde{\psi}$ обеспечивает ее нормировку в переменных \tilde{x} :

$$\int |\tilde{\psi}|^2 d\tilde{x} = \int |\psi|^2 dx.$$

В этих переменных уравнение (3) принимает вид

$$\tilde{\psi}''(\tilde{x}) + (\tilde{E} - \tilde{U})\tilde{\psi} = 0. \quad (7)$$

Далее мы будем иметь дело именно с уравнением для безразмерных переменных, а знак „тильда“ будем опускать.

¹Это легко проверить, подставив в выражение dW/dx значения ψ'' из (3)

²Обращаем внимание, что мы сочли удобным поставить не m , а $2m$, поэтому наши единицы не совпадут с так называемыми атомными (их называют также *хевисайдовскими*).

Возможность ввести безразмерные переменные означает, что выполняются определенные законы подобия. При одинаковых зависимостях потенциальной энергии $\tilde{U}(\tilde{x})$ явления отличаются лишь масштабом. Например, количества связанных состояний частицы в прямоугольных потенциальных ямах глубины U и ширины a одинаковы при одинаковых значениях параметра mUa^2/\hbar^2 .

2.4 Решения уравнения Шредингера при постоянном потенциале $U(x)$ и при кусочно-постоянном $U(x)$

Сначала не будем касаться физической постановки задачи, а будем интересоваться только решением уравнения (7).

При заданном значении E это уравнение имеет два линейно независимых решения. Если $U = \text{const}$, то общий вид решения при $U > E$

$$\psi(x) = A e^{-\varkappa x} + B e^{\varkappa x}, \quad (8)$$

где

$$\varkappa = \sqrt{U - E}, \quad (9)$$

при $U < E$

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx, \quad (10)$$

где

$$k = \sqrt{E - U}. \quad (11)$$

Здесь A и B — произвольные постоянные, которые определяются в соответствии с физической постановкой задачи.

Если же поле $U(x)$ является кусочно постоянным,

$$U(x) = U_j \quad \text{при } x_{j-1} < x < x_j, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (12)$$

то на каждом участке решение имеет вид (8) или (10), причем постоянные A и B могут быть выбраны произвольно на одном каком-либо участке, а на всех прочих определяются после этого однозначно условиями „сшивки“:

$$\psi(x_j - 0) = \psi(x_j + 0), \quad (13)$$

$$\psi'(x_j - 0) = \psi'(x_j + 0). \quad (13)$$

Наша компьютерная программа основана именно на задаче с кусочно постоянными полями. Хотя это и сужает класс возможных задач, выбор их остается не просто богатым, а можно сказать, необъятным. Кусочно-постоянными полями можно моделировать, как мы увидим, множество физических систем.

2.5 Поиск связанных состояний в поле $U(x)$

Напомним, как можно найти связанные стационарные состояния в заданном поле. В качестве простого примера возьмем прямоугольную потенциальную яму с бесконечной стенкой:

$$U(x) = \begin{cases} \infty & \text{при } x < 0 \\ -V_0 & \text{при } 0 < x < a \\ 0 & \text{при } a < x \end{cases} \quad (14)$$

Условие $\psi(0) = 0$ диктует выбор константы в (9) $B_1 = 0$, так что для $x \in (0, a)$ волновая функция имеет вид

$$\psi(x) = \sin kx. \quad (15)$$

Для $x > a$ волновая функция имеет вид

$$\psi = A_2 e^{-\varkappa(x-a)} + B_2 e^{\varkappa(x-a)} \quad (16)$$

(по сравнению с (7) константы в (16) определены по-иному; кроме того, не заботясь сейчас о нормировке волновой функции, мы приняли $A_1 = 1$), а правила сшивки (12) и (13) дают

$$\sin ka = A_2 + B_2, \quad k \cos ka = \varkappa(-A_2 + B_2), \quad (17)$$

откуда

$$B_2 = \frac{1}{2} \left(\sin ka + \frac{k}{\varkappa} \cos ka \right). \quad (18)$$

Энергии связанных состояний определяются из условия $\psi|_{x \rightarrow \infty} \rightarrow 0$:

$$B_2(E) = 0, \quad (19)$$

или более подробно

$$\sin \left[(V - |E|)^{1/2} a \right] + \sqrt{\frac{V - |E|}{|E|}} \cos \left[(V - |E|)^{1/2} a \right] = 0. \quad (20)$$

Не будем здесь подробнее анализировать решения этого уравнения.

Подобным же образом решает такую задачу компьютер. Если поле задано на нескольких участках, то на крайнем принимаются такие значения констант, чтобы волновая функция стремилась к нулю при $x \rightarrow -\infty$ (то есть $A = 0$, $B = 1$, в уравнении (7)), а затем с помощью “правил сшивки”(12) и (13) при заданном значении энергии E численно находятся коэффициенты A_j , B_j последовательно на всех участках, где задано поле. После этого остается решить уравнение

$$B_N(E) = 0, \quad (21)$$

разумеется, также численно. Для этого на обследуемом интервале энергий строится, с определенным шагом, функция $B_N(E) = 0$, находятся те шаги, на границах которых эта функция изменяет знак, а уж в этих интервалах уравнение (21) решается с высокой точностью (методом секущих).

Кстати, зависимость $B_N(E)$ можно, если появится потребность, увидеть и на экране.

Примерно таково же соотношение между аналитическими способами решения других задач, которыми студенты овладевают на семинарах, и численными, — которыми пользуется компьютер. Очевидно, что для любого студента в таком случае не может быть ничего таинственного в способах действия компьютера.

Правда, компьютер способен решать задачи несравненно более громоздкие, чем это можно было бы сделать аналитически. А если бы мы имели тем не менее аналитическое решение (полученное, скажем, тоже с помощью компьютера), все равно для анализа его пришлось бы в каких-то случаях строить графики. Но во многих случаях человек может качественно предвидать результат решения задачи, найденное решение представляется естественным или наоборот удивительным. Круг таких вопросов должен заметно вырасти после работы в этом практикуме.

2.6 Распределение по импульсам

Напомним, что собственная функция импульса, отвечающая собственному значению p ,

$$\phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}, \quad (22)$$

а в безразмерных переменных

$$\phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}, \quad p = \hbar k/a_0. \quad (22')$$

Представляя волновую функцию $\psi(x)$ в виде

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(k) \phi_k(x) dk, \quad (23)$$

мы вводим *волновую функцию в импульсном представлении* $\varphi(k)$. Очевидно, $\varphi(k)$ содержит в конечном счете такую же информацию о состоянии, как $\psi(x)$. Уравнение (23) — просто разложение Фурье. Непосредственно же можно интерпретировать функцию $|\varphi(k)|^2$ так: вероятность того, что импульс частицы лежит в интервале $(k, k + dk)$, равна

$$dw = |\varphi(k)|^2 dk. \quad (24)$$

Смысл этого утверждения примерно таков: если бы мы мгновенно “выключили” поле $U(x)$, то образовался бы волновой пакет, который стал бы “расплываться”. Поставленные на большом расстоянии счетчики зарегистрировали бы сигналы с разными задержками по времени; интенсивность сигналов определяется величиной dw , а задержка — величиной импульса. (Нетрудно сообразить, что для одномерной задачи эта картина близка к картине дифракции волн на открытом конце волновода.)

Функция $\varphi(k)$ находится с помощью обратного преобразования:

$$\varphi(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_k^*(x) \psi(x) dx. \quad (25)$$

Компьютер вычисляет этот интеграл по готовым аналитическим выражениям для каждого участка, где $U(x) = \text{const}$, и складывает результаты. Это делается для каждого значения k (естественно, не буквально, а с некоторым шагом).

Стоит заметить, что $\varphi(k)$ — комплексная функция, поэтому рассматривать по отдельности её действительную и мнимую части имеет мало смысла, тем более, что при смещении начала отсчёта координат $\text{Re}\varphi(k)$ и $\text{Im}\varphi(k)$ „перекачиваются“ друг в друга.

2.7 Зависимость волновой функции от времени

Любую волновую функцию можно представить в виде суперпозиции волновых функций стационарных состояний

$$\Psi(x, t) = \sum_E c(E) \psi_E(x) e^{-iEt/\hbar}. \quad (26)$$

(В области непрерывного спектра сумму следует заменить на интеграл по dE .) Коэффициенты разложения $c(E)$ могут быть найдены, например, если известна волновая функция в начальный момент.

Стоит сразу же сделать одно замечание. Зависимость (26) включает в себя изменение фазы функции, определяемое некоторым характерным значением энергии и несущественное для физических следствий (в той же мере, как несущественен выбор начала отсчета энергии). Существенными же являются разности энергий, входящих в сумму. Поэтому, между прочим, наблюдая зависимость состояния от времени, предпочтительно просматривать не $\operatorname{Re} \psi(x, t)$, $\operatorname{Im} \psi(x, t)$, а $|\psi(x, t)|^2$.

В программе предусмотрены два вида суперпозиций.

Суперпозиция, построенная из состояний дискретного спектра решает задачу об изменении со временем волновой функции связанного, но не стационарного состояния. Каким бы ни было начальное состояние, со временем слагаемые, отвечающие непрерывному спектру, “убегут” из области потенциальной ямы и в яме и ближайших ее окрестностях останется вклад именно такой суперпозиции.

Волновой пакет, приходящий в область поля с далекого расстояния, — это суперпозиция состояний непрерывного спектра. В программе QUANTX такой волновой пакет представляется приближенно — в виде не интеграла, а суммы нескольких (~ 10) слагаемых. Естественно, здесь возможны артефакты — “явления” вызванные способом наблюдения. Это полностью аналогично хорошо знакомому по практикуму по электродинамике дискретному преобразованию Фурье.

Для дискретного спектра можно наблюдать изменение со временем не только распределений по координатам, но и по импульсам.

2.8 Коэффициент прохождения

Как известно, в квантовой механике, в отличие от классической, частица может отразиться от потенциальной ямы и может пройти сквозь потенциальный барьер. Задача об отражении частицы полностью подобна аналогичной задаче оптики.

В области $x > x_N$ имеем $U = 0$, а волновая функция складывается из падающей и отраженной волн³

$$\psi = C_1 e^{-ikx} + C e^{ikx}, \quad (27)$$

а при $x < 0$ есть только прошедшая волна:

$$\psi = D e^{-ikx} \quad (28)$$

(чтобы не усложнять запись, мы приняли — здесь, а не в программе, — что $U = 0$ также и при $x < 0$). Коэффициент прохождения $T = |D/C_1|^2$, коэффициент отражения $R = |C/C_1|^2 = 1 - T$.

И компьютер, и человек решают задачу одинаково. Выбираем какое-то значение энергии, принимаем $D = 1$, производим сшивки волновых функций и производных во всех точках, где потенциал $U(x)$ испытывает скачок, и находим в итоге C , C_1 , T , R . Только человек делает сшивки в аналитической форме, а компьютер — численно.

Естественно затем нормировать волновые функции так, чтобы амплитуда падающей волны C_1 была равна единице.

2.9 Состояния в периодическом поле

Периодическое поле имеет прямое отношение к физике электронов в кристаллах. Период поля обозначим a .

³Мы рассматриваем волну, падающую из области $x > 0$; во многих пособиях принято иное направление падающей волны, но нам так удобнее осуществлять сшивку.

Задача о состояниях частицы в периодическом поле решается компьютером тоже „стандартным“ способом.

Выберем какое-либо значение энергии. Ему отвечает пара независимых решений уравнения Шрёдингера. В качестве базиса выберем функции $\varphi_1(x)$ и $\varphi_2(x)$, такие, что

$$\varphi_1(0) = 0, \quad \varphi_1'(0) = 1, \quad (29)$$

$$\varphi_2(0) = 1, \quad \varphi_2'(0) = 0. \quad (30)$$

На участке, где $U(x) = \text{const}, E > U, x < 0$, это

$$\varphi_1(x) = \frac{1}{k} \sin kx, \quad \varphi_2(x) = \cos kx, \quad (31)$$

(при $E < U$ тригонометрические функции нужно заменить гиперболическими). Нетрудно продолжить каждую из этих функций на участок $0 < x < a$.

Поставим задачу найти функцию такую $\psi(x) = C_1\varphi_1(x) + C_2\varphi_2(x)$, которая одновременно являлась бы собственной функцией оператора сдвига на период:

$$\psi(x + a) = \lambda\psi(x). \quad (32)$$

Очевидно для неё также

$$\psi'(x + a) = \lambda\psi'(x). \quad (33)$$

При $x = 0$ эти равенства приводят к системе уравнений

$$C_1\varphi_1(a) + C_2\varphi_2(a) = \lambda C_2,$$

$$C_1\varphi_1'(a) + C_2\varphi_2'(a) = \lambda C_1,$$

Эта система уравнений относительно C_1, C_2 , линейных и однородных, имеет нетривиальное решение, если равен нулю её детерминант, что приводит к уравнению относительно λ

$$\lambda^2 - 2\Lambda\lambda + W = 0,$$

где $W = \varphi_1\varphi_2' - \varphi_2\varphi_1'$ — вронскиан системы базисных функций, который проще всего вычислить при $x = 0$, $W = 1$, а $2\Lambda = \varphi_1'(a) + \varphi_2(a)$. Согласно теореме Виета корни этого уравнения удовлетворяют соотношению $\lambda_1\lambda_2 = 1$.

Если $D = \Lambda^2 - 1 > 0$, то $\lambda_1 > 1$, $\lambda_2 < 1$. В этом случае $|\psi_1(x)| \rightarrow \infty$ при $x \rightarrow +\infty$, $|\psi_2(x)| \rightarrow \infty$ при $x \rightarrow -\infty$. Такие решения подобно функциям $e^{\pm\lambda x}$ при $U(x) = 0$, $E < 0$. Они нужны для описания локализованных состояний, которые могут возникать при наличии нарушений периодичности. Для движения в периодическом поле они образуют запрещённую зону.

Если $D < 0$, то $\lambda_1^* = \lambda_2$, $|\lambda_{1,2}| = 1$. Оба значения λ можно представить в виде $\lambda = e^{iqa}$, где различные значения получаются, например, при выборе величины q в пределах от $-\pi/a$ до π/a . Величина $\hbar q$ называется квазиимпульсом (а при нашем выборе единиц и q — квазиимпульс). Интервал энергий, в котором $D < 0$, называется разрешённой зоной.

Описанным выше процедурам, приводящим к определению запрещённых и разрешённых энергетических зон, вполне можно „научить“ компьютер. Студент „вручную“ может проделать то же для поля

$$U = g \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$$

(или такого же поля, но обратного знака).

3 Как работать с программой

3.1 Быстрый старт

Запускаем kvant.exe. Открывается окно, под заголовком программы находится строка основных меню: File, Потенциалы, Зависимости, Доп. зависимости. Третья строка – панель инструментов. Она начинается с кнопки Model, которая позволяет выбрать граничные условия, далее следуют кнопки задания потенциала и просмотра энергий насчитанных уровней, краев подзон или квазистационарных состояний.

Варианты счета выбираются в меню «Зависимости», при этом открывается новое окно, которое при желании можно закрыть. Масштабы и дополнительные параметры, такие как номера уровней, параметры волнового пакета, можно задать в контекстно-зависящем меню, которое открывается при нажатии на правую кнопку мышки в поле графического окна. Там же имеется «Help» и задания («Tasks»). Пояснения к данному варианту счета можно получить при нажатии комбинации клавиш Ctrl-H, текст заданий – Ctrl-T. Потенциал меняется мышкой в окне « $U(x) \& E_n$ » или задается численно в меню «Потенциалы» или на панели инструментов кнопкой «Un», которая запрашивает потенциал из одинаковых ям или барьеров. Таблица уровней открывается при нажатии кнопки «En».

По умолчанию установлена модель Bound states/Scattering. В этой модели решается стационарное уравнение Шредингера с граничными условиями экспоненциального затухания волновой функции на $-\infty$ при $E < U$ при $x < 0$, либо бегущей туда волны e^{-ikx} при $E > U$ ($x < 0$) и $E > 0$, что соответствует прохождению плоской волны, падающей на потенциал справа, из $+\infty$. Состояния дискретного спектра находятся из дополнительного условия зануления волновой функции на $+\infty$ при некоторых энергиях $E_n < U(x < 0)$ и $E_n < 0$. В данной модели в крайней правой области потенциал предполагается нулевым, и при любой $E > 0$ волновая функция в этой области имеет вид $A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$. Коэффициент отражения R есть $|A/B|^2$, а коэффициент прохождения $T = 1 - R$. В этой же модели из найденных стационарных состояний дискретного, либо непрерывного спектра может быть собран волновой пакет.

Если не понятно, прочитайте start этот параграф снова.

3.2 Потенциал и уровни энергии

Все параметры в программе заданы по умолчанию, они соответствуют сравнительно простым физическим задачам по соответствующим темам. Так, установлен потенциал из одной ямы и первый пункт меню «Зависимости», а именно, $U(x) \& E_n$ – задание потенциала и просмотр дискретных уровней энергии. Работа с программой начинается в этом окне, поскольку оно позволяет изменять потенциал и энергию с помощью мышки. Численные значения параметров потенциала контролируются из меню Потенциалы (пункт «Табличный»). Найденные уровни отображаются в таблице уровней E_n (см. через вызов в панели инструментов) и разноцветными горизонтальными линиями на фоне потенциала. Можно задать номер уровня n в текстовой строчке ниже графического окна и рядом увидеть энергию для данного n . Масштабы для потенциала задаются в контекстном меню – доступ к нему появляется при нажатии правой кнопки мыши, когда курсор находится в графическом окне, но не касается показанных линий.

3.3 Изменение энергии

Чуть выше потолка ямы (по умолчанию задано $E = 0.1$) есть также пунктирная (зеленая) горизонталь. Она изображает свободно и непрерывно меняемую энергию E в уравнении Шредингера. Решение, соответствующее этой энергии, использует граничное условие лишь на $-\infty$. Значение энергии можно видеть в текстовой строке ниже графического окна. Если его отредактировать, оставляя положительным, или сделать отрицательным, то (после нажатия клавиши Enter) положение пунктирной линии изменится. Линию энергии (бегунок энергии), в отличие от сплошных линий уровней, можно двигать вверх-вниз с помощью мышки. При совмещении этой линии с уровнями или горизонтальными полками потенциала можно видеть их примерные численные значения. Кроме значения E , выдается значение коэффициента прохождения T , если $E > 0$, либо N – полного числа нулей волновой функции (без одного) при любой $E < 0$. Можно на числах увидеть как меняется $T(E)$, начиная с нуля, а также N при изменении $E < 0$, особенно вблизи E_n . Кнопка с зеленым треугольником запускает расчет с автоматическим изменением энергии в некотором диапазоне с шагом hE . Это позволяет быстро просмотреть волновые функции и/или коэффициенты прохождения, когда открыты соответствующие окна.

3.4 Изменение потенциала мышкой

Подобно бегунку энергии, кусочно-постоянный потенциал можно менять мышкой, если его отрезки зацепить, что отображается изменением цвета отрезка и заменой сплошного отрезка на пунктирный. Зацепленный отрезок можно тащить – горизонтальный вверх-вниз (кроме крайнего справа, где $U = 0$), а вертикальный вправо-влево (кроме крайнего слева, где $x = 0$). При этом ломанная, изображающая потенциал, остается непрерывной. Изменения графика $U(x)$ сразу отражаются в таблице потенциала, доступной из меню Потенциалы, а редактирование чисел в таблице передается графику $U(x)$ (после изменения числа и нажатия клавиши «Enter», либо после возвращения курсора в графическое окно и нажатия левой кнопки мыши). Изменение потенциала сразу вызывает пересчет дискретных уровней E_n , что видно из картины их положений, а также из таблицы E_n , если она открыта.

По умолчанию в программе потенциал задан на двух отрезках, примыкающих к точке $x = 0$, т.е., имеется одна прямоугольная яма. Этот вариант, из которого легко получить потенциальную ступень или яму/барьер, примыкающие к ступени, является основным для аналитического решения уравнения Шредингера. Потенциал в программе можно легко усложнять либо численным заданием параметров, либо непосредственно в графическом окне.

3.5 Числовое задание потенциала

Рассмотрим вариант численного задания потенциала. Кнопка «Un», расположенная на панели инструментов, позволяет задать потенциал из нескольких эквидистантных одинаковых прямоугольных ям/барьеров, который сразу же отображается графически. Через меню «Потенциалы» можно добавить к ранее заданному потенциалу кусочно-постоянный «линейный» склон (в точке x_N потенциал закреплен) или задать кусочно-постоянный «параболический» потенциал глубиной U_0 с управляемым числом точек разбиения и длиной отрезка $(0, x_N)$. При задании «линейного» потенциала автоматически устанавливается значение $U(x < 0)$. При задании «параболического» потенциала

автоматически устанавливается $U(x < 0, x > x_N) = 0$.

3.6 Усложнение потенциала мышкой

Рассмотрим графический вариант усложнения формы потенциала. Можно разбить выбранный отрезок потенциала на два (кроме полубесконечных), нажав правую кнопку мышки и выбрав из подсказки пункт «Split here», а затем перетаскивая соседние горизонтальные и вертикальные отрезки, как сказано выше. Напротив, можно упрощать потенциал, удаляя выделенный горизонтальный отрезок (нажав правую кнопку мышки и выбрав из подсказки пункт «Remove segment»). Ломанная, изображающая потенциал, остается непрерывной. Появление, исчезновение отрезков потенциала сразу отражается в таблице потенциала, доступной через меню «Потенциалы». Можно подправлять параметры через эту таблицу, добиваясь точных численных значений. Заметим, что редактирование через «Un» немедленно заменит графически усложненный потенциал на другой (строго симметричный и с другими параметрами).

3.7 Контекстное меню

Контекстное меню окна открывается правой кнопкой мыши при нажатии на пустую область графического окна. Оно позволяет задавать масштабы и некоторые другие параметры, такие как номера уровней и параметры волнового пакета, вызывать «Help» и задания «Tasks».

3.8 Координатные распределения

Второй пункт « $\psi_n(x)$ » меню «Зависимости» открывает окно координатных распределений. Волновые функции связанных состояний показаны теми же цветами, что и уровни энергии в окне потенциала. Горизонтальные координаты такие же, как в окне графического определения потенциала, чтобы было понятно расположение особенностей волновых функций относительно особенностей в $U(x)$. Если в верхнем графическом окне мышкой тронуть бегунок энергии E , то появится дополнительная волновая функция, отвечающая этой переменной энергии. Полезно посмотреть, как меняется волновая функция при прохождении энергии через уровень.

3.9 „Виляние хвостиком“

Чтобы наглядно представить себе связь состояний дискретного спектра с потенциалом, полезно следить за деформацией волновых функций, когда $U(x)$ меняется непрерывно вручную, например, сужением или обмелением ямы. Вопрос на понимание: что и почему происходит с волновой функцией, когда $U(x < 0)$ резко увеличивается, или наоборот, приближается сверху к соответствующему уровню. Под графическим окном волновых функций есть строка, позволяющая выбор их представления (реальная, мнимая части и квадрат модуля). Полезно посмотреть, чем они отличаются. Чтобы прояснить смысл непрерывного спектра энергий, его важное отличие от дискретного спектра, а также смысл состояний стационарного рассеяния полезно переместить бегунок энергий в область положительных энергий и непрерывно менять энергию, следя за деформируемым координатным распределением, действительной или мнимой частью волновой функции.

3.10 Изменение масштабов стрелками

Координатное распределение своими интересными особенностями (горизонтальной полкой в области прохождения и крупными осцилляциями в области отражения) может выходить за границы окна, тогда без изменения физических масштабов можно переместить потенциал и соединенное с ним координатное распределение вправо-влево простым нажатием соответствующей клавиши-стрелки на клавиатуре, аналогично можно смещать распределение вверх-вниз.

3.11 Отмена изображения уровневых функций

Контекстное меню варианта « $\psi_n(x)$ » позволяет выбирать номера уровней для рассмотрения. Если в меню номера уровней задать хотя бы одно отрицательное значение, то можно рассматривать только функцию с варьируемой энергией без изображения уровневых функций. Очистить окно от прежних изображений можно нажатием на клавиатуре клавиши "del". Пересчитать и нарисовать уровневые функции можно кнопкой «зеленый треугольник». Любое графическое окно можно закрыть нажатием на красный крестик в нижнем углу окна и потом открыть из меню «Зависимости».

3.12 Вопросы: Координатные распределения

Почему при симметричном потенциале координатные распределения в дискретном спектре симметричны, а в непрерывном, как правило, асимметричны? Почему в непрерывном спектре при $x < 0$ в $|\psi_n(x)|^2$ имеем полку, а при $x > x_N$ осцилляции? Почему они обычно растут и растягиваются при приближении E к нулю? Что при этом происходит с коэффициентом прохождения? Как и почему различаются фазы осцилляций реальной и мнимой части волновой функции при $x < 0$? Как (и почему именно так) выглядят координатные распределения для асимметричного потенциала, когда $0 < E < U_l$, $U_l = U(x < 0)$? Чему равен коэффициент прохождения? Чем от этих случаев отличаются «экзотические варианты» $U_l < E < 0$, $E = U_l$.

3.13 Вопросы: Координатные распределения и число нулей $\psi_n(x)$

Для лучшего понимания процедуры поиска связанных состояний и особенностей в непрерывном спектре полезно, выбором пункта « $T(E)$ » в меню «Зависимости», открыть окно, которое одновременно предназначено для показа двух графиков. Энергия в данном окне откладывается по горизонтали. При отрицательных энергиях изображается ступенчатая зависимость $N(E)$ – полного числа нулей $\psi_n(x)$ (за исключением того, что установлен руками на $-\infty$). Полезно бегунком энергии (в окне « $T(E)$ » он изображается вертикальной линией) исследовать переходы между соседними плато на этой ступенчатой линии, следя сразу за тремя окнами и, особенно, за тем, как меняется волновая функция при изменении энергии.

3.14 Вопросы: Координатные распределения и коэффициент прохождения $T(E)$

При $E > 0$ в графическом окне « $T(E)$ » изображается коэффициент прохождения. Чтобы лучше понять смысл резонансов (пиков) полного прохождения в случае простых симметричных $U(x)$ (одной прямоугольной ямы, барьера) полезно бегунком энергии

находить в непрерывном спектре состояния с $T = 1$ и следить за изменением фазы осцилляций $|\psi(x)|^2$ в области отражения. Как и почему меняется положение и ширина этих резонансов с изменением ширины ямы/барьера? Под графическим окном « $T(E)$ » имеется кнопка запуска расчетов (слева) и кнопка «Erase» справа. Первую можно применить, если изображение отсутствует, например, после удаления клавишей «Delete», вторую использовать для изображения семейства соответствующих кривых, если отменить стирание (птичку в квадратике «Erase»).

3.15 Импульсные распределения

Окно импульсного распределения $|\phi_n(k)|^2$ подчиненно координатному: выбор номеров уровней происходит в окне координатных распределений. Масштабы задаются в контекстном меню.

3.16 Вопросы: Координатные и импульсные распределения

Полезно мышкой в графическом окне потенциала менять ширину ямы и следить за тем, как меняется вид импульсных и координатных распределений. Особенно интересны моменты появления новых уровней. Можно одновременно следить за трансформацией коэффициента прохождения $T(E)$, если открыто соответствующее окно. Как и почему именно так выглядят импульсные распределения для узкой и широкой прямоугольной ямы.

3.17 Временная эволюция волнового пакета

Две последние возможности в меню «Зависимости» касаются временной эволюции суперпозиции стационарных состояний в координатном и импульсном представлении. Внешний вид окон такой же, как в случае стационарных распределений. Масштабы задаются так же. Знакомство с пакетом необходимо начинать открытием соответствующего окна координатных распределений, в котором можно наблюдать результат смешивания дискретных состояний, либо имитировать волновой пакет, собранный в непрерывном спектре из эквидистантных энергий. Обе возможности открываются в данном окне так же, как масштабы через контекстные меню. Веса гармоник распределены в виде гауссовской функции (по энергии в непрерывном спектре, либо по номерам уровней в дискретном спектре).

3.18 Задания: волновой пакет

Знакомство с временной эволюцией состояний дискретного спектра лучше начинать с не очень широкой прямоугольной ямы, например, заданной по умолчанию. Полезно прерывать движение, нажатием на клавишу остановки/возобновления расчетов, чтобы изменить, например, шаг по времени (пункт «ht» в меню «time parameters» контекстного меню). Для прерывания расчетов под графическим окном предусмотрена кнопка останова (зеленый треугольник кнопки запуска расчетов меняется в ходе расчетов на кнопку с двумя шпалами, приглашающую прервать расчет). Расчеты будут быстрее, если увеличить шаг по x и шаг по времени.

При изучении временной эволюции суперпозиции связанных состояний откройте два окна $\Psi(x, t)$ и $|\Phi_n(k, t)|^2$. Запуск и формирование суперпозиции идет через первое

окно. В случае широкой ямы полезно сравнивать знак среднего импульса с положением и направлением движения пакета в координатном представлении.

Наблюдение эволюции в непрерывном спектре требует резко расширить интервал наблюдения по x , чтобы видеть, как пакет подходит к яме и рассеивается на ней. При этом лучше увеличить шаг по x , чтобы сократить время расчета волновых функций. Полезно прерывать движение, как в предыдущем пункте, например, чтобы лучше разглядеть момент столкновения пакета с ямой. Можно повторять рассмотрение с самого начала, если в табличке задания «time parameters» вернуть текущее время «time» к начальной нулевой точке. Полезно сравнить рассмотренную по предыдущему пункту динамику с однонаправленным движением пакета из тех же гармоник в свободном пространстве (глубину ямы сделать нулевой и вернуть время к начальной точке). Интересно наблюдать медленное расплывание волнового пакета, а при рассмотрении $Re\Psi(x, t)$ увидеть различие фазовой и групповой скорости — отставание движения огибающей от перемещения частых осцилляций внутри огибающей. Расчет импульсного распределения в непрерывном спектре отсутствует.

3.19 Автоматическая деформация потенциала

Автоматическая деформация потенциала производится после определения начального U_1 и конечного U_2 потенциалов на одинаковом числе интервалов (Например, начальная яма глубокая, а конечная – мелкая). Любой такой потенциал можно назначить начальным (нажатием кнопки «U1» на панели инструментов программы), а другой – конечным (кнопкой «U2»). Промежуточные потенциалы на интервале i U_i и ширины отрезков d_i являются линейными функциями параметра z ($0 \leq z \leq 1$): $U_i = U_{1i}(1-z) + U_{2i}z$, $d_i = d_{1i}(1-z) + d_{2i}z$, $0 \leq i \leq N$. Например, по умолчанию U_1 это широкая, а U_2 – очень узкая яма. В меню «Доп.возможности» предусмотрены варианты «En(z)» и «T(z)», открывающие окна, в которых строятся, соответственно, зависимость уровней энергии и коэффициента прохождения от z . В этих окнах вертикальной пунктирной линией дается бегунок по z , позволяющий увидеть для интересных мест на графике $E_n(z)$ соответствующий потенциал $U(x)$, волновые функции, импульсное распределение, $T(E)$, если открыты соответствующие окна.

При некотором освоении вышеуказанных возможностей и понимании свойств многоямных (барьерных) потенциалов можно избрать одно из двух направлений дальнейшего знакомства с программой – периодический потенциал или квазистационарные состояния.

3.20 Периодический потенциал и края зон

Пункт «Periodic» из меню «Model» позволяет периодически распространить заданный потенциал на отрезке $(0, x_N)$ на всю действительную ось, чтобы изучать состояния зонного спектра. Для простоты необходимо начинать с потенциала на отрезке $(0, x_N)$ в виде одной ямы, например, заданной по умолчанию. Заметим, что при выборе пункта «Periodic» автоматически добавляет один отрезок нулевого потенциала справа к тому потенциалу, который задавался при работе с другими пунктами меню «Model». В окне потенциала покажется столько ям и разделяющих барьеров, сколько разрешают масштабы по x , которые регулируются обычным для данной программы образом. На фоне потенциала соответствующим цветом показаны края разрешенных зон.

3.21 Распределения по x и k в периодическом потенциале

Если открыть окно волновых функций « $\psi_n(x)$ », то в нем будут показаны волновые функции краев подзон. Полезно по виду $Re\psi(x)$ усмотреть, каким квазиимпульсам отвечает каждое состояние, обратить внимание на число и положение нулей, увидеть основной и дополнительный периоды осцилляций.

Если открыть окно импульсного распределения, в нем автоматически отобразятся теми же цветами края зон. Состояния здесь рисуются со сдвигом по вертикали, поскольку импульс принимает эквидистантные значения с универсальным шагом для всех краев зон (почему?). Найдите в этом представлении основной и дополнительный периоды осцилляций $Re\psi(x)$. Посмотрите большой интервал по энергии и объясните попарную группировку импульсных распределений.

По прежнему, можно бегунком энергии, который имеется в графическом окне потенциала (зеленый пунктир), управлять энергией, приближенно измерять E и видеть соответствующую волновую функцию. Интересно пройти внутри разрешенных и запрещенных зон, чтобы увидеть разницу в типе координатных распределений и волновых функций. Для этого можно сузить масштаб по вертикали для потенциала, чтобы уменьшить шаг графического варьирования E . Полезно разглядеть на графике $Re\psi(x)$ квазиимпульс. Как (и почему именно так) отражается непрерывное изменение энергии на импульсном распределении. Где на графике импульсного распределения виден квазиимпульс? Как соотносятся квазиимпульс и наиболее вероятный импульс?

Графическая модификация потенциала в этой модели производится также обычно, но управлять можно только потенциалом на исходном $(0, x_N)$ и добавленном отрезках, и период (в программе обозначается буквой a) будет автоматически поддерживаться неизменным. Полезно наблюдать трансформацию волновых функций краев зон при варьировании параметров потенциала и разглядеть, как (и почему именно так) она отражается на высоте основных и дополнительных пиков импульсного распределения. Изменить период потенциала и другие его параметры можно из численной таблицы потенциала, либо из пункта «Un».

3.22 Закон дисперсии

Закон дисперсии, зависимость квазиимпульса от энергии « $qa(E)$ », находится в меню дополнительных зависимостей. Если ее построить, то будет видно, каким квазиимпульсам отвечают состояния в разрешенных зонах. При изменении энергии внутри зоны можно видеть, как меняется средняя скорость частицы.

3.23 Задачи к периодическому потенциалу

Как определяются по закону дисперсии средняя скорость и эффективная масса частицы? Как они меняются с ростом номера разрешенной зоны и внутри зон? Можно построить волновой пакет из состояний в разрешенной зоне и сопоставить направление движения максимума $|\Psi(x)|^2$ с номером зоны, направлением квазиимпульса, положением основного пика импульса и направлением средней скорости.

Полезно с помощью «Un» задать вместо одной две (потом три) ямы на периоде и объяснить форму закона дисперсии, посмотреть, как изменится импульсное распределение для краев зоны и его поведение с изменением E внутри зон. Рассмотрите и объясните форму и движение волнового пакета, сформированного в таком же окне энергий, как для одной ямы на периоде.

3.24 Деформация зонного спектра

Если менять мышкой параметры потенциала из двух (нескольких) одинаковых ям на периоде, то можно видеть трансформацию зонного спектра и закона дисперсии. Соответственно, можно назначить начальный и конечный потенциалы, сформированные графически, либо таблично, и посмотреть зависимость краев зон от z : $E_n(z)$. Полезно бегунком z рассмотреть интересные моменты на этой зависимости в окнах волновых функций и импульсного распределения.

3.25 Квазистационарные состояния

Выбор пункта «Quasistationary» из меню «Model» вместо «Bound states/Scattering» означает, что для тех же потенциалов с конечным числом отрезков, будет решаться задача на поиск и визуализацию квазистационарных состояний. Это подразумевает, во-первых, такое же разделение переменных x и t в нестационарном уравнении Шредингера, как в стационарном случае, т.е. представление волновой функции в виде произведения $\Psi(x, t) = \psi(x) \exp(-iE_c t)$, но энергия E_c является не действительной, а комплексной $E_c = E + iG$. Дополнительно к прежним решениям мы будем рассматривать "распадные" состояния, т.е. состояния в нижней полуплоскости e , для которых $|\Psi(x, t)|^2$ убывает со временем. Чтобы не запутаться с граничными условиями, рассмотрим сначала более ясный случай нулевого потенциала на $\pm\infty$. Тогда задача при произвольной $E + iG$, $G < 0$ решается по аналогии с задачей стационарного рассеяния. При $x < 0$ решение задается в виде уходящей волны $\psi(x) = \exp(-ikx)$. При $x > x_N$ получается $\psi(x) = A \exp(ikx) + B \exp(-ikx)$, где $k^2 = E + iG$ принадлежит нижней полуплоскости и корень из $E + iG$ извлекается так, что $k = k_R + ik_I$ принадлежит четвертому квадранту, независимо от знака E ($k_R > 0$, $k_I < 0$). При $x < 0$ получается $\exp(-k_R x) \exp(k_I x)$ – бегущая влево волна нарастающей влево амплитуды. Соответственно, при $x > x_N$ будем иметь $A \exp(ik_R x) \exp(-k_I x) + B \exp(-ik_R x) \exp(k_I x)$, т.е. интерференцию убегающей вправо и падающей справа волн. В данном случае дискретные квазистационарные состояния, по определению, отвечают отсутствию приходящих волн, т.е. формально такому же условию, как при поиске дискретных стационарных состояний ($B = 0$ на $N + 1$ -ом отрезке по x). Важное отличие в том, что теперь коэффициент B это комплексно-значная функция $ReB + iImB$ комплексной переменной $E + iG$, и нужно найти значения этой переменной, в которых зануляется функция, т.е. одновременно обращаются в ноль ReB и ImB . Можно ожидать, что множества точек $ReB(E, G) = 0$ и $ImB(E, G) = 0$ будут одномерными областями на плоскости (E, G) – линиями, которые могут пересекаться только в изолированных друг от друга точках.

Этот общий подход к описанию рассеяния можно применить и к ранее изученному случаю $E < 0$, $G = 0$. Но нужно понимать, что по обычным правилам (и в программе) корень из действительной отрицательной величины извлекается с расположением результата в верхней, а не нижней полуплоскости. Поэтому в приведенные выше общие выражения нужно подставить $k_R = 0$ и $k_I > 0$. Например, при $x < 0$ получается действительное решение $\psi(x) = \exp(k_I x)$, которое остается действительным на всей оси x , т.е. коэффициент B становится действительной величиной. Следовательно, мы возвращаемся к обычному выражению для ? при произвольной $E < 0$, и при правильной процедуре поиска нулей B на всей плоскости $E + iG$ должны найтись и дискретные стационарные уровни. Очевидно, что при этом одна из интересующих нас линий $ImB(E, G) = 0$ совпадает с полуосью отрицательных действительных E и достаточно находить ее пересечения с линиями $ReB(E, G) = 0$.

3.26 Методы поиска нулей на комплексной плоскости

В программе реализовано два метода решения уравнения $B_{N+1} = 0$ на комплексной плоскости. Для начала полезно ознакомиться с первым, как более наглядным и надежным. Он выполняется после вызова пункта « $B_{N+1}(E + iG)$ » и нажатия кнопки с зеленым треугольником ниже соответствующего графического окна. При этом переменная $E + iG$ пробегает шагами hE, hG по всей решетке внутренних точек некоторого прямоугольника на плоскости (E, G) . Границы четырех областей изображаются разными цветами: 1 – $ReB > 0, ImB > 0$; 2 – $ReB > 0, ImB < 0$; 3 – $ReB < 0, ImB > 0$; 4 – $ReB < 0, ImB < 0$. Следовательно, линия $ImB = 0$ лежит между границами областей 1-2 и, соответственно, 3-4, а линия $ReB = 0$ проходит между границами областей 1-3 и 2-4. Места встречи всех четырех областей указывают положение искомым точек с точностью до размера прямоугольничка (hE, hG) . В этих местах запускается алгоритм секущих, уточняющих дискретные значения $E_n + iG_n$ итерациями: $e_{i+1} = e_i - B_i(e_i - e_{i-1}) / (B_i - B_{i-1})$, где $e = E + iG$, e_0 и e_1 – противоположные вершины трехцветного малого ромба. Их выбор не однозначен, но, по опыту, результат применения алгоритма секущих получается одинаковым. Найденные $E_n + iG_n$ складываются в таблицу, вызываемую на экран пунктом « $E_n + iG_n$ ». Заметим, что hE, hG и границы большого прямоугольника заданы по умолчанию, и могут быть переопределены из контекстных меню, открываемых правой кнопкой мыши.

Этот общий метод находит дискретные значения и на полуоси отрицательных действительных энергий, если задать $G_{max} > 0$ и $E_{min} = U_{min}$. Поведение границ областей 1,2,3,4 по разные стороны этой оси является странным и не столь ясным, как при $G < 0$ (почему?). В связи с этим, полезно по таблицам энергий и по виду волновых функций проверить совпадение найденных на оси состояний с обычными уровнями энергии в том же потенциале.

Альтернативный метод поиска дискретных состояний при $G < 0$ является более быстрым, поскольку для него предварительное сканирование проводится лишь по E при фиксированном малом отрицательном G . При этом, как можно понять из предыдущей полной картины, бегунок E последовательно и поочередно встречает линии $ImB = 0$ и $ReB = 0$. Пары точек изменения знака ImB (либо ReB) считаются точками e_0 и e_1 запуска алгоритма секущих. Любой из этих стартов, в случае сходимости алгоритма секущих, находит лишь правильные точки $B = 0$, как и в первом методе. Из-за сложного рельефа функции $B(e)$ и большой дистанции до искомой точки (неудачных значений e_0, e_1), второй метод может промахиваться (расходиться или циклиться), и тогда итерации автоматически прерываются. Однако, несмотря на некоторые пропуски состояний, этот быстрый метод автоматически применяется, как только выбирается пункт «Quasistationary» из меню «Model», либо переопределяется потенциал. В результате, на фоне потенциала соответствующим цветом рисуются горизонтальные линии E_n для найденных $E_n + iG_n$, а сами комплексные числа складываются в таблицу, вызываемую пунктом « $E_n + iG_n$ ». Если ранее было открыто окно с прямоугольником (E, G) , то в нем эти точки автоматически располагаются со стиранием прежнего изображения. Полезно следить за изменением положения этих точек при изменении потенциала мышью. На самом деле, дискретные квазистационарные состояния можно считать уширенными уровнями энергии с шириной, определяемой G_n . Соответствующее распределение по действительным энергиям частицы дается формулой Брейта-Вигнера: $W(E) = 1 / (1 + (E - E_n)^2 / G^2)$.

3.27 Контуры Брейта-Вигнера

Для удобства контуры Брейта-Вигнера можно нарисовать в окне $T(E)$. По умолчанию рисуется найденное состояние с наименьшей E_0 при $G < 0$. Полезно расширять одну яму и видеть, как это состояние появляется при положительных E_n , но исчезает при малых отрицательных, но хвост распределения $W(E)$ все еще виден при $E > 0$. Интересно, что вид волновой функции квазистационарного состояния $\psi_n(x)$ почти не меняется, когда E_n проходит через ноль. Состояние было и остается в обе стороны от нуля распадным, что видно по квадрату модуля. Можно считать, что это «странное» поведение есть результат присутствия существенной части энергий из распределения Брейта-Вигнера в области $E > 0$.

3.28 Зависимость от времени квазистационарных состояний

Если открыть окно волнового пакета в координатном представлении, то можно посмотреть за временной эволюцией одиночного квазистационарного состояния, либо их суперпозиции (то и другое заказывается по номерам n) через выбор соответствующего контекстного меню, нажатием правой кнопки мыши. Интересно смотреть не только квадрат модуля, но также эволюцию реальной части волновой функции. Интересно понять, что и почему произойдет с $Re\Psi_n(x, t)$, если E_n изменит знак при небольшом изменении потенциала. Просто и интересно выглядят квазистационарные состояния в случае, аналогичном резонансному туннелированию через пару или несколько одинаковых барьеров.

3.29 Квазистационарные состояния в особых случаях

Прежнее определение в смысле отсутствия приходящих волн легко обобщается и сохраняется в силе для состояний на плоскости (E, G) , отвечающих значениям $E > \max(U(x < 0), 0)$, либо $E < \min(U(x < 0), 0)$. В первом случае имеется распад в обе стороны и квадрат модуля растет быстрее в сторону большего потенциала (почему?). Во втором случае мы имеем дело с обычными уровнями, для которых ситуация с квадратом модуля противоположна.

Вопрос о граничных условиях при поиске квазистационарных состояний не прост в случае промежуточных энергий $\min(U(x < 0), 0) < E < \max(U(x < 0), 0)$. Глубоко внутри этой области энергий ширина квазистационарных дискретных уровней будет много меньше, чем $\max(U(x < 0), 0) - E_n$. Лишь малая доля частиц из распределения Брейта-Вигнера будет иметь действительную энергию выше, чем $\max(U(x < 0), 0) - E_n$. Поэтому кажется разумным формально запретить распад в потенциальную ступень, поскольку по физике он вряд ли возможен при большой величине $\max(U(x < 0), 0) - E$. Например, так делается в случае потенциала с бесконечной стенкой, на которой $\psi(x = 0) = 0$, и распад идет в одну сторону. Тогда при конечной, но высокой ступени можно считать, что при $G < 0$ "волна втягивается" из ступени, чтобы затем уйти в том же направлении на другую бесконечность. Если при этом $U(x < 0) > 0$, то при $x < 0$, волновая функция задается в виде приходящей волны $\exp(ik_0x)$, $k_0 = k_{0R} + ik_{0I}$ ($k_{0R} > 0$, $k_{0I} < 0$), т.е. $\psi(x) = \exp(ik_{0R}x) \exp(-k_{0I}x)$. На другой стороне однако вид волновой функции такой же, как раньше и поиск квазистационарных состояний это поиск нулей функции $B(E + iG)$. Если, наоборот, $U(x < 0) < 0$ и $E < 0$, то граничные условия меняются на противоположные. Из $+\infty$ идет только приходящая волна $B \exp(-ik_Rx) \exp(k_Ix)$, но зато при $x < 0$ волновая функция в зада-

че рассеяния при комплексной энергии имеет общий вид $A_0 \exp(ik_{0R}x) \exp(-k_{0I}x) + B_0 \exp(-ik_{0R}x) \exp(k_{0I}x)$. Следовательно, поиск дискретных квазистационарных состояний ведется по условию $A_0 = 0$. К сожалению, трудно четко определить, какая ступень является достаточно высокой, чтобы менять граничные условия, как сказано в этом пункте. Поэтому мы меняли их просто по формальному условию попадания в окно энергий $\min(U(x < 0), 0) < E < \max(U(x < 0), 0)$. При этом для некоторых потенциалов будет потеряно состояние, которое только что опустилось под $\max(U(x < 0), 0)$ и является распадным в обе стороны из-за конечной ширины распределения Брейта-Вигнера. Поскольку эти потери случаются редко и суть потерь ясна, в программе мы их не отслеживаем.

3.30 Запись и чтение файлов

Меню «File» содержит пункты выхода из программы, чтения из файла, записи в файл и пункт краткого пояснения к программе Kvant. Можно воспользоваться файлами данных на этапе первоначального знакомства с программой или для быстрых демонстраций на лекциях и семинарах без использования продвинутых возможностей интерактивного управления.

Задачи для решения с помощью программы Квант

4 О заданиях

4.1 Цель практикума

Эти задачи, решаемые в режиме вычислительного эксперимента с готовой программой, придуманы, чтобы сделать квантовую механику <ручной> и наглядной, прояснить ее понятия и закономерности, развить Вашу интуицию и образное мышление, так необходимые физикам.

Мы начинаем с простой по сути одномерной (1D) квантовой механики, которая важна с образовательной точки зрения и стала интересной для экспериментаторов в связи с появлением реальной инженерии наномасштабных 1D-потенциалов. Квантовые явления в соответствующих объектах разнообразны и иногда используются с большой выгодой. Например, они работают в ультра-компактных полупроводниковых элементах сложных устройств, которые находятся дома и в кармане у каждого. Забавно, что на современном компьютере Вы изучаете 1D квантовую механику при помощи электронных процессов, в которых она играет свою роль.

Еще мы хотим дать Вам на будущее пример эффективной компьютерной технологии в сфере образования и исследований.

4.2 Тип задач

Вполне ясным и строгим общим алгоритмом мы за малое время моделируем гораздо больше квантовых объектов и эффектов, чем при традиционном обучении. Все потенциалы, к которым применяется этот алгоритм, являются достаточно произвольными кусочно-постоянными функциями одной координаты.

Некоторые простые задачи в каждой теме, например, про прямоугольную яму, помогают лучше понять суть алгоритма и анализировать ответы, которые вы можете получить аналитически. Однако в большинстве случаев трудно или невозможно вывести

конечные формулы, и остаются лишь численные, хотя и точные (до ошибок округления), решения. Плавные потенциалы с неограниченной точностью имитируются ступенчатыми при достаточно большом числе отрезков. Экспериментируя с параметрами, получая разные графики и числа необходимо найти и увидеть общие эффекты для некоторых типичных условий.

Центральным является вопрос, какие объекты мы при этом моделируем. На качественном уровне и для учебных целей ими могут быть свободная волна-частица, абстрактные <атом>, линейная молекула, кристалл. Если говорить о более серьезном описании реальности, то резкие разрывы потенциала могут быть сделаны лишь для частиц с большой длиной волны по сравнению с атомными размерами (субэлектрон-вольтовых электронов и ультра-холодных нейтронов). Общей, хоть и не единственный, рецепт получения 1D-кусочно-постоянного потенциала для электронов такой. Современные полупроводниковые технологии позволяют выращивать в едином кристалле чередующиеся слои разных составов и толщин с весьма совершенными <гетерограницами>. Управляя составами можно получить разные потенциалы, которые чувствует электрон в слоях, т.е. резкие разрывы потенциала на гетерограницах. Перпендикулярно к слоям может быть приложено внешнее однородное электрическое поле, что даст линейный ход потенциала $U(x)$ в слоях. Вводя в структуру заряд с концентрацией $\rho(x)$ можно еще больше усложнить потенциал. Разумеется, при таком способе получения 1D-потенциала движение электрона вдоль слоев остается свободным. Более интересные эффекты относятся к движению поперек слоев. Еще проще делаются и аналогично работают твердотельные многослойники для ультра-холодных нейтронов.

4.3 Характер работы

Упор в задачах делается на самостоятельный поиск интересных результатов без навязывания хода решения. Сведений по управлению программой Квант в задачах нет – они вынесены в отдельную инструкцию, основы которой можно быстро освоить, и обращаться к ней по мере необходимости.

В задачу полезно вчитываться, чтобы не пропустить главного. Вопросы носят стимулирующий и <наводящий> характер, и иногда их больше, чем можно осилить за одно занятие. Мы ожидаем от Вас самостоятельного выбора и учитываем различие индивидуального опыта и склонностей.

Как минимум, предполагается, что Вы активны и сможете описать свои находки (словами и на схематических графиках) товарищам и преподавателям. Вопросы, живое общение в ходе и после занятий приветствуются, как и совместный поиск правильных объяснений найденного. Оценок не ставится – достаточно, если Вы откроете для себя интересное и новое.

5 Свободное движение

5.1 Стационарные Ψ -функции

Начнем с самого простого – нормировки состояний непрерывного спектра. Занулите глубину ямы и скажите, чему равна площадь под кривой $|\Psi(x)|^2$ при $E > 0$ и какова в нашем случае амплитуда падающей волны? Сравнивая $Re\Psi(x)$, $Im\Psi(x)$ скажите, какой знак имеет импульс частицы. Чем в данном случае является кривая $3D:\Psi(x)$? Как зависит период на этих кривых от E ?

5.2 Волновой пакет

Сформируйте пакет из равноотстоящих по $E > 0$ состояний: $\Psi(x, t) = \sum \beta_j \cdot \Psi_j(x) e^{-iE_j t}$, $E_{highest} \geq E_j \geq E_{lowest}$. Рассмотрите $|\Psi|^2$, $Re\Psi$, $3D:\Psi$ сначала для случая одной гармоники, потом двух близких по E и, наконец, многих волн (вес гармоник β_j автоматически задан гауссовской функцией по E_j). Первый и второй варианты нужны, чтобы напомнить о временной зависимости стационарных состояний и ясно показать различие фазовой и групповой скорости (какое оно из теории?). К чему ведет это различие в пакете из многих гармоник? Проверьте что $\Psi(x, t)$ является периодической функцией t , т.е. содержит бесконечную серию <пакетов>. (Из скоростей вращения всех векторов $exp(-iE_j t)$ на комплексной плоскости найдите наименьшее время, через которое они снова совпадут). По числу гармоник и средней энергии предскажите и на числах проверьте расстояние между центрами <пакетов>. Как зависит ширина <пакета> от $E_{highest} - E_{lowest}$?

6 Потенциальная ступень

6.1 Стационарное рассеяние частицы ступенью

Рассмотрите столкновение частицы с энергией $E > 0$ с простейшим препятствием – резкой ступенью в виде $U(x < 0) < 0$. Почему при $x < 0$ в $|\Psi(x)|^2$ имеем полку, а справа осцилляции? Почему они растут и растягиваются при приближении E к нулю? Что при этом происходит с коэффициентом прохождения? Объясните форму кривой $3D:\Psi(x)$.

Пусть $U(x < 0) > 0$. При каких x , E имеется стоячая волна, и в каких особенностях графиков видны ее проявления? То же самое для бегущей и затухающей волны.

Найдите в $T(E)$ и координатных распределениях сходство с тем, что дала бы классическая механика в подобной задаче, а также принципиальные отклонения от классики. Например, докажите, что давление на стенку получается одинаковым при $E < U_{max}$, причем, в квантовой механике его можно вычислять и через $|\Psi(x = 0)|^2$. А что будет при $E > U_{max}$? Почему в квантовой механике ступень (спуск) отражают частицы при $E > U_{max}$? При каком условии плотность вероятности внутри ступени максимальна, чему она равна и каков в данном случае коэффициент прохождения?

6.2 Столкновение волнового пакета с резкой ступенью

Рассмотрите тот же самый пакет по энергии, как в задаче про свободное движение. Что и почему происходит с кривыми $|\Psi(x, t)|^2$, $Re\Psi(x, t)$, $3D:\Psi(x, t)$, когда пакет подходит близко к ступени и далее со временем?

Полезно смотреть движение пакетов из низких и больших энергий по сравнению с $U(x > 0)$, а также сопоставить со стационарным решением случай, когда пакет собран из состояний близких по энергии к $U_{max} > 0$. Почему падающий <пакет> в этом случае, даже на большом расстоянии от ступени, усеян частыми осцилляциями?

6.3 Размытая ступень

Несколькими ступеньками промоделируйте плавный переход от U_{max} до 0. Это может быть модель потенциала в плоском конденсаторе. Как изменятся $|\Psi(x)|^2$ в случаях $E < U_{max}$, $E > U_{max}$, а также $T(E)$ по сравнению с резким переходом? Каким нужно

взять размер области изменения $U(x)$, чтобы $T(E)$ стало почти таким же, как для классических частиц? Почему малые отличия T от 1.0 хорошо заметны по осциллирующей плотности вероятности в области, откуда падает частица?

7 Имитация δ -функциональной ямы/барьера

7.1 Уровень в мелкой яме

Управляя параметрами a, U -шириной и глубиной прямоугольной потенциальной ямы, получите почти прижатый к потолку уровень E_0 . Насколько точно, если судить по числам U, a, E_0 и внешнему виду $\Psi_0(x)$, данная яма соответствует модели δ -ямы? (Аналитически из правил шивки $\Psi(x)$ для δ -ямы найдите связь ее мощности с параметрами U, a , приняв во внимание поведение $\Psi_0(x)$ внутри имитирующей ямы). Соответствуют ли данной имитации зависимости $E_0(a), E_0(U)$ построенные программой? На числах проверьте соотношение неопределенностей Гейзенберга, и по поведению $\Psi_0(x)$ предскажите внешний вид $|\phi_n(k)|^2$ в пределе $E_0 \rightarrow 0$.

7.2 Коэффициент прохождения в случае мелкой ямы

Является ли мелкая широкая яма хорошей моделью δ -функциональной ямы, если судить по дискретному спектру? Тот же вопрос для непрерывного спектра и $T(E)$. Сравните коэффициенты прохождения и координатные распределения для « δ -ям» и « δ -барьеров» одинаковой мощности.

7.3 « δ -яма» в потенциальной ступеньке

Предскажите и численно найдите момент исчезновения уровня в « δ -яме» при повышении/опускании потенциала слева от ямы. Какую форму имеют в этот момент $\Psi(x), |\phi_n(k)|^2$? Почему численно найденная $U_l = U(x < 0)$ в момент исчезновения уровня заметно отличается от предсказанного. Какой вид имеет зависимость $E_0(U_l)$. Что происходит с $T(E)$ при изменении $U_l < 0, U_l > 0$, пока в яме имеется уровень?

8 Широкие яма/барьер

8.1 Прямоугольная яма с несколькими уровнями

По форме $\Psi_n(x)$ при $E_n \rightarrow 0$ сообразите, при каком условии на глубину и ширину ямы появляется очередной уровень n , и как для него выглядит $|\phi_n(k)|^2$ в сравнении с более глубокими уровнями E_m ($m \leq n$)? Чем объясняется почти одинаковый «размах» по вертикали для $\Psi_m(x)$ с разными m и малый «размах» для уровня прижатого к потолку ямы? Как предвидеть число, положение и ширину больших пиков импульсного распределения, исходя из графиков $\Psi_m(x)$? Как зависят от m средняя кинетическая, средняя потенциальная энергия и сила, с которой частица давила бы на стенки ямы. Чему равны эти величины в пределе $E_n \rightarrow 0$?

Если увеличивать $U(x < 0)$, то какие уровни это почувствуют раньше и почему? Что и почему происходит с волновой функцией, когда $U(x < 0)$, наоборот, приближается сверху к соответствующему уровню. Какова плотность вероятности на левой стенке ямы, если она известна для правой? Проверьте на числах Ваше предсказание

для каких-нибудь уровней. Как найти силу, с которой частица давит на левую стенку, если $U(x < 0) = \infty$. Каким в этом случае будет условие на появление в яме единственного или очередного уровня?

Пусть на краю широкой ямы имеется узкое углубление, так чтобы E_0 был ниже дна широкой части. Объясните вид $\Psi_n(x)$, $|\phi_n(k)|^2$. Выборочно убедитесь, что сумма всех сил (с учетом знака) в точках разрыва потенциала в любом состоянии есть 0.

8.2 Ход уровней при расширении прямоугольной ямы

Какова зависимость $E_n(z)$ (z -ширина ямы) пока уровни остаются мелкими или становятся глубокими. Чему равна dE_n/dz в момент появления уровней? Рассматривая поведение $|\Psi_n(x)|^2$ опишите, как от z зависит сила, с которой частица давит на стенки ямы, сопоставьте это поведение с $E_n(z)$ и другим выражением для силы ($-dE_n/dz$). Чем для глубоких уровней объяснить параллельность линий $E_n(z)$, когда z -глубина ямы? Предскажите и проверьте, как меняются импульсные распределения $|\phi_n(k)|^2$ с ростом ширины (глубины) ямы.

8.3 Виртуальные уровни

Что за пики на кривой $T(E)$, как и почему меняется их положение и ширина с изменением ширины ямы? Что происходит с $T(E)$ возле точки $E = 0$ при расширении прямоугольной ямы перед появлением нового уровня? Как это выглядит на зависимости $T(z)$ при малом $E > 0$, когда увеличивается z - ширина (глубина) ямы? Как и почему меняется положение и ширина этих резонансов с изменением E ? В чем сходство и различие координатных распределений для резонансов T по z и для появившихся уровней?

8.4 Надбарьерные резонансы

Для достаточно широкого потенциального барьера посмотреть и объяснить $T(E)$, $T(z)$ с одновременной визуализацией $|\Psi(x)|^2$ (особенно в точках максимума и минимума) коэффициента прохождения.

8.5 Волновой пакет в широкой прямоугольной яме: колебания на начальной стадии

Для широкой ямы со многими уровнями ($n \approx 50 \div 100$) сформировать волновой пакет $\Psi(x, t) = \sum \beta_n \cdot \Psi_n(x) \exp(-iE_n t)$ из уровней с $E > U/2$ на некотором интервале по n , (вес гармоник β_n автоматически задан гауссовской функцией по n). Познакомиться с $|\phi_n(k)|^2$ на том же интервале по n . Рассмотреть временную эволюцию огибающей волнового пакета $|\Psi(x, t)|^2$ и его «наполнения» $\Re\Psi(x, t)$ или $\Im\Psi(x, t)$, пока пакет не очень расплылся. Сопроводить рассмотрение на этом начальном интервале времени наблюдением пакета в импульсном представлении $|\phi(k, t)|^2$. Как выглядит $|\phi(k, t)|^2$, когда пакет в координатном представлении прижат к стенке, либо оторван от них? Провести аналогию с классической частицей (моменты времени, когда огибающая является гладкой). Объяснить появление частых осцилляций в координатном распределении, когда пакет подходит к стенкам ямы. Как (и почему именно так) ведут себя в это время $Re\Psi(x, t)$ и $Im\Psi(x, t)$, $\Im\Psi(x, t)$?

8.6 Расплывание и возрождение волнового пакета в широкой прямоугольной яме

Продолжая наблюдение на большом интервале времени (увеличив шаг ht по сравнению с предыдущим упражнением) следить за расплыванием пакета, наступлением стадии «квантового хаоса», а затем за появлением дробных и целых возрождений (правильной и даже исходной формы) волнового пакета. Учитывая вид $|\phi_n(k)|^2$ для смешиваемых волн, рассмотреть аналогию с бегунами на стадионе, у которых скорости эквидистантны.

8.7 Модель осцилляторной ямы

Рассмотрите уровни энергии, волновые функции, импульсные распределения и движение волнового пакета в ступенчатом потенциале, имитирующем осцилляторную яму, обрезанную справа и слева нулевым потенциалом. Почему наиболее высокий уровень желательно рассматривать отдельно? Каково положение уровней относительно дна ямы? Почему внешние пики $|\Psi_n(x)|^2$ больше и толще внутренних? Почему $|\phi_n(k)|^2$ подобны $|\Psi_n(x)|^2$? Как зависят средняя кинетическая и средняя потенциальная энергия частицы от n ? Почему волновой пакет из уровней этой ямы движется периодически и чему равен период колебаний? (См. задачу про пакет в свободном пространстве). Как соотносятся между собой $|\Psi(x, t)|^2$ и $|\phi(k, t)|^2$? Каким окажется период, если смешать каждое второе состояние?

8.8 Модель треугольной (трапецевидной) ямы

Ступеньками задайте потенциальную яму в форме треугольника или трапеции (модель постоянного электрического поля). Как меняется дистанция между уровнями с ростом n ? Почему частица на уровнях выше основного предпочитает менее глубокую часть ямы?

8.9 Плавный барьер

Вершина плавного барьера может считаться параболой. Рассмотрите $T(E)$, $T(z)$ и $|\Psi(x)|^2$ в случае перевернутого осцилляторного потенциала из предыдущего упражнения (z -ширина барьера в основании). Чему равен коэффициент прохождения при $E = \max U(x)$ и почему в $T(E)$ нет осцилляций, а на графике $T(z)$ при надбарьерном прохождении они тоже сильно подавлены? Заметим, что в Л.Л. (М.1974. стр. 220) приведено решение для $T(E)$ в случае идеальной параболы, и ступень в $T(E)$ имеет такую же форму, как знаменитая функция Ферми–распределение фермионов по энергии при разных температурах (только перевернутую по энергии). Какие величины в нашем случае формально аналогичны уровню Ферми и температуре? Почему здесь нет надбарьерных резонансов? Почему в <осцилляторной> яме при малых E все еще есть пики $T(E)$, которые эквидистантны в $T(z)$, т.е. наблюдаются виртуальные уровни?

8.10 Модель потенциала $U_0/ch^2(x/a)$

Рассмотрите уровни энергии, волновые функции и импульсные распределения в ступенчатом потенциале, имитирующем яму $U_0/ch^2(x/a)$. Почему уровни сгущаются к потолку и внутренние пики $|\phi_n(k)|^2$ выше и уже внешних. Смешайте уровни верхней

части спектра (аналогично задаче про широкую прямоугольную яму) и наблюдайте дробное и полное возрождение волнового пакета. Посмотрите $T(E)$, $T(a)$ для этой ямы и барьера (замена знака U_0), а также $|\Psi(x)|^2$ при небольших $E > 0$ и, соответственно при $E > |U_0|$ и разных a . Куда делись виртуальные уровни, которые были в случае прямоугольной и даже параболической ямы? Заметим, что в Л.Л. (М.1974. стр. 105) приведено решение для $T(E)$ в случае потенциала $U_0/ch^2(x/a)$, <хвосты> которого у нас все же обрезаны.

9 Пара ям–модель двухатомной молекулы

9.1 Пара одинаковых ям–модель ковалентной связи

Пусть расстояние между ямами соизмеримо с длиной <хвоста> $Re\Psi_0(x)$. По внешнему виду $Re\Psi_n(x)$ объясните попарную группировку уровней и скажите из какого уровня одной ямы произошли те или иные уровни для пары ям. Почему симметричные состояния лежат немного ниже, а антисимметричные слегка выше, чем <родительский> уровень? Почему $E_1 - E_0 \ll E_3 - E_2$?

По виду $|\Psi(x)|^2$ для пары нижних уровней скажите, в каком состоянии средняя потенциальная энергия частицы имеет наименьшее (наибольшее по модулю) значение. Почему для полных энергий E_n получается наоборот?

По давлению частицы на внешние и внутренние потенциальные стенки скажите притягиваются ли ямы друг к другу? В каких состояниях частица стремится сблизить ямы? (В химии они называются связывающими молекулярными орбиталями). В каких состояниях, наоборот, частица расталкивает ямы (они называются антисвязывающими).

9.2 Импульсное распределение в двух ямах

Объясните вид $|\phi_n(k)|^2$ по зависимостям $Re\Psi_n(x)$ (наличие двух побочных максимумов для основного состояния, близость характерных импульсов для $n = 1, 2$, совпадение положений побочных максимумов для $n = 0$ с положением основных максимумов для $n = 3$). Объясните вид графиков $|\phi_n(k)|^2$ для двух нижних уровней по аналогии с дифракцией частиц на открытом конце пары связанных плоских волноводов или на двух щелях ($k_x/k_y = \text{tg}(\theta)$, где y –вдоль волновода, θ – угол дифракции). Рассмотрите разность хода от центров щелей до точки на экране и по виду $Re\Psi(x)$ покажите, что будет наблюдаться необходимое чередование черных и белых полос. Какой была бы картина дифракции $|\phi(k)|^2$, если бы ямы находились далеко друг от друга? Как соотносятся огибающая кривой почернения с $|\phi(k)|^2$ для основного состояния в одной яме?

9.3 Однопараметрическое изменение симметричной пары ям

Что произойдет с уровнями, волновыми функциями и давлением частицы на стенки, если увеличить дистанцию между ямами в 2-3 раза? Предскажите и проверьте с помощью $E_n(z)$ изменение спектра уровней с при раздвигании ям. Укажите на этих графиках силу, с которой частица притягивает (отталкивает) ямы. Найдите на рисунке связывающие и антисвязывающие <молекулярные орбитали>.

Предскажите изменение спектра уровней при отрастании узкого барьера между одинаковыми ямами. Почему антисимметричные состояния неподвижны?

Предложите двух-ямный потенциал, с локализацией частиц на разделяющем промежутке (в каком либо из уровней). Как соотносится этот эффект с резонансами при прохождении частиц через прямоугольный барьер? Меняя ширины ям и разделяющего промежутка, рассмотрите процессы столкновения уровней с локализацией в ямах и в барьере.

9.4 Осцилляции во времени

Для двух одинаковых ям рассмотрите временную эволюцию суперпозиции пары уровней $\Psi_m(x) \exp(-iE_m t) + \Psi_n(x) \exp(-iE_n t)$. Почему движение периодически и сильно различаются характерные времена колебаний $Re\Psi(x, t)$ и $|\Psi(x, t)|^2$? Будет ли частица излучать электромагнитные волны, если смешать 0-ой и 1-ый (0-ой и 2-ой) уровни?

9.5 Пара разных ям— модель ионной связи в двухатомной молекуле

Объясните эффект локализации волновой функции и смены области локализации с ростом n в слегка асимметричной паре ям. Почему эффект сильнее для нижних уровней? К чему ведет подобная локализация в реальности, если верхний из заполняемых уровней в разных атомах, рассмотренных по отдельности, недозаполнен и в одном из атомов лежит выше, чем в другом (разные потенциалы ионизации)?

Объясните зависимость E_n от расстояния между ямами. Рассмотрите изменение уровней при неизменной одной яме и постепенном уменьшении глубины соседней более глубокой ямы до нуля. Наблюдайте столкновение и <антипересечение> уровней, отвечающее сначала равенству ям, а потом их сильному различию. Как выглядят волновые функции в момент такого антипересечения? Почему, и при каких условиях на положение уровней отдельных атомов, это позволяет ковалентную связь.

При какой минимальной разности глубин сильная локализация частиц в ямах исчезнет? Рассмотрите изменение уровней энергии при встречном изменении глубин исходно разных ям (<поляризация> внешним полем, меняющимся от ϵ до $-\epsilon$ —линейный эффект Штарка при большом поле и и параболический вблизи $\epsilon = 0$).

10 Несколько ям—модель «кристалла»

10.1 Несколько одинаковых ям

Пусть ширина барьера между одинаковыми эквидистантными ямами соизмерима с длиной <хвоста> $Re\Psi_0(x)$. Объясните наличие <зон> разной ширины в спектре уровней. Оценивая по виду $Re\Psi(x)$ волновые числа k , покажите, что энергия основного состояния понижается, если вместо двух одинаковых ям взять несколько таких же эквидистантно расположенных ям. Покажите что верхний край нижней зоны лежит выше, чем второй уровень для двух ям. Покажите, что при нечетном числе ям средний по номеру уровень в <зоне> почти совпадает с уровнем в одной яме.

Исходя из сил в точках разрыва потенциала скажите для каких краев зон частица притягивает (расталкивает) ямы. Почему сходны $|\Psi_n(x)|^2$ для состояний равноотстоящих по n от краев <зоны> (например: второго и предпоследнего в зоне)? Исходя из формы $Re\Psi_n(x)$ объясните положение пиков импульсного распределения для краев зон и для состояний внутри нижней зоны. Как связана ширина пиков с числом ям?

10.2 Переход от непрерывного к зонному спектру

Нарисуйте зависимость спектра уровней от расстояния между ямами. В каких состояниях частица стремится сблизить (оттолкнуть) ямы? Что при этом происходит со средней потенциальной (кинетической) энергией электронов?

Почему Na легко образует кристалл, а Ne нет?

Рассмотрев изменение спектра при отрастании гребенки узких барьеров на дне широкой ямы, объясните неподвижность некоторых состояний и образование зон. Образуются ли зоны, если барьеры заменить ямами?

10.3 Таммовский уровень

Проследите на волновых функциях и E_n что происходит с состояниями зон в N ямах, когда увеличивается $U(x < 0)$? (Модель поверхности кристалла с большой работой выхода электронов). А если сделать наоборот? Объясните появление локализации. Почему делокализованные состояния <избегают> яму возле $x=0$? Сравните волновые функции первого и второго <поверхностных состояний>, почему затухание вглубь кристалла будет разным?

Как (и почему именно так) выглядят зависимости уровней от расстояния между ямами? Образуются ли поверхностные состояния в случае узких барьеров? Рассмотрите столкновение таммовского уровня с <объемными> состояниями при сближении ям. Найдите поверхностные состояния для гребенки узких ям на дне широкой ямы.

10.4 Модель примесной ямы в длинной молекуле

Слегка расширьте (углубите) или сделайте уже (мельче) одну из нескольких одинаковых ям, объясните изменения спектра и волновых функций, которые при этом произойдут. Рассмотрите случаи с симметричным и несимметричным расположением <примесной ямы>. Объясните эффекты попарной группировки уровней в зоне и смены области локализации частицы с повышением n . Почему делокализованные состояния <избегают> примесную яму.

10.5 Штарковская лестница

Рассмотрите спектр, $Re\Psi_n(x)$, $|\Psi_n(x)|^2$, $|\phi_n(k)|^2$, когда на <конечный кристалл> действует электрическое поле. Объясните эквидистантность спектра уровней, произошедших, например, из нижней зоны, и почему межуровневая дистанция больше для крайних номеров, чем для внутренних? Проследите за преобразованием зонного спектра в штарковские лестницы на графиках $E_n(z)$, где z -электрическое поле.

10.6 Блоховские осцилляции

Сформируйте волновой пакет из всех состояний штарковской лестницы, возникших из нижней зоны кристалла из N ям. Наблюдайте колебания $|\Psi(x, t)|^2$, $|\phi_n(k, t)|^2$, и объясните их периодичность. Почему с одной скоростью перемещаются пики импульсного распределения.

11 Квазиуровни

11.1 Пара барьеров

Найдите классически запрещенные состояния полной прозрачности для пары одинаковых нешироких барьеров (по сравнению с характерной длиной затухания волновой функции). Какой вид имеет волновая функция для этих резонансов внутри и между барьерами? Почему вероятность найти частицу в квантовом колодце резко возрастает при резонансной энергии? Что происходит с временем жизни частицы в резонаторе при увеличении толщины барьеров? Как связаны энергии резонансов с положением связанных состояний в яме, ширина которой равна расстоянию между барьерами, а глубина совпадает с их высотой?

Что происходит с $T(E)$ и резонансными $|\Psi(x)|^2$, когда один барьер меняет свою высоту (толщину)? Что будет, если различные барьеры поменять местами?

11.2 Три барьера

Как изменится график $T(E)$, если перейти от двух барьеров к трем? Какой вид будут иметь $|\Psi(x)|^2$ для нижнего и следующего квазиуровней, а также для точки минимального T между ними? Почему в последнем случае частица локализуется в одной из ям? Почему залечивается данный провал в $T(E)$, если крайние барьеры сделать в два раза уже внутреннего (тройник Иогансена)?

11.3 Несколько барьеров

Исследуйте образование <зонной> структуры квазиуровней с увеличением числа барьеров. Объясните эффекты сгущения и сужения резонансов к краям нижней <зоны> квазиуровней.

12 «Зоны» для нескольких ям при $E > 0$

Найдите свидетельства образования <зон> в непрерывном спектре нескольких одинаковых ям. Как меняется глубина провалов $T(E)$ между соседними <зонами> резонансов при изменении числа одинаковых ям? Как выглядит волновая функция в области этих провалов (главных максимумов брэгговского отражения при нормальном падении волн)?

Сравните между собой кривые $T(E)$ внутри разрешенных зон при разных числах ям (или барьеров). Что можно сказать о нижних огибающих? Какова связь минимумов $T(E)$ в разрешенной <зоне> с резонансами на разных частях потенциальной гребенки?

13 Квазистационарные состояния

13.1 Пара барьеров

Найдите дискретные комплексные энергии $E_n + iG_n$ распадных (квазистационарных) состояний для двух барьеров. В чем отличие этих состояний от квазиуровней в стационарном рассеянии, если судить по виду $|\Psi(x, t = 0)|^2$ и $Re\Psi(x, t = 0)$? (Сравните

направление движения волн). Разберитесь по описанию в Инструкции к программе в граничных условиях, отвечающих состояниям для произвольных $E + iG$, $G < 0$, а также в двух процедурах поиска дискретных квазистационарных состояний. Сравните также положение и ширину распределений Брейта-Вигнера с $T(E)$ для этих же барьеров.

Рассмотрите временную эволюцию на графиках $|\Psi(x, t)|^2$, $\text{Re}\Psi(x, t)$, $\text{Im}\Psi(x, t)$ отдельно для нижнего и следующего квазистационарных состояний. В чем проявляется уход волн от области размещения барьеров? (По динамике плотности вероятности сравните эти случаи со случаем суперпозиции двух квазистационарных состояний).

Что происходит с квазистационарными состояниями при изменении ширины (глубины) одного из барьеров?

13.2 Несколько барьеров

Сделайте предыдущее упражнение для нескольких барьеров. Как размещены на плоскости (E, G) квазистационарные состояния, отвечающие уровням нижней и следующим зонам квазиуровней? На каких величинах и графиках, и как именно, проявляется более трудный распад крайних состояний в зоне?

13.3 Квазистационарные состояния для ямы/барьера

Исследуйте квазистационарные состояния для одного прямоугольного барьера. Покажите, что они аналогичны надбарьерным резонансам стационарного рассеяния.

Рассмотрите квазистационарные состояния для одной прямоугольной ямы. Как связаны они с виртуальными уровнями в стационарном рассеянии? Найдите случаи, когда действительная часть энергии квазистационарного состояния становится отрицательной, но мнимая отлична от 0. Сравните в этом случае распределение Брейта-Вигнера с $T(E)$ для той же ямы и объясните возможность таких распадных состояний. Как они соотносятся со связанными состояниями.

13.4 Квазистационарные состояния для ямы $U_0/\text{ch}^2(x/a)$

Как показано в Л.Л. (М.1974. стр. 105), $T = 1$ для любых $E > 0$ в случае потенциала $U_0/\text{ch}^2(x/a)$. Таким образом, кажется у этой ямы нет виртуальных уровней. Предлагается рассмотреть квазистационарные состояния и прояснить эту ситуацию построением распределений Брейта-Вигнера на фоне $T(E)$. Проверьте, что значения $E_n + iG_n$ слабо зависят от числа ступеней, имитирующих данный потенциал, если оно велико. Есть ли квазистационарные состояния для барьера той же формы? Если да, то как это согласуется с отсутствием резонансов в $T(E)$?

14 Периодический потенциал

14.1 Одна яма на периоде

Задайтесь характерным периодическим потенциалом: пусть период содержит одну прямоугольную яму с малым числом уровней и рядом с ней имеется отрезок нулевого потенциала, ширина которого соизмерима с $1/\sqrt{E_0}$. Посмотрите расположение краев зон E_n на интервале от дна ямы до достаточно большого $E_{\text{max}} > 0$. Как меняются ширины разрешенных и запрещенных зон с ростом E ?

Полезно сравнить положение зон с результатами решения задач про конечное число ям. По аналогии с этими задачами исследуйте, в том числе на зависимостях $E_n(z)$, формирование и трансформацию зонного спектра при изменении глубины (ширины) ямы при фиксированной ширине разделяющего промежутка с $U = 0$, изменении ширины промежутка b между неизменными ямами, а также изменении U на тонких ($b \ll 1$) разделяющих промежутках от глубоких отрицательных до больших положительных значений при условии $|U|b^2 \ll 1$.

Вернитесь к характерному периодическому потенциалу. Какой вид имеют $Re\Psi(x)$, $Im\Psi(x)$, $3D:\Psi(x)$ для краев зон, внутри разрешенных и запрещенных зон? Где на этих графиках квазиимпульс? Чему он равен для краев зон? Какие значения имеет квазиимпульс в запрещенной зоне? По форме $Re\Psi(x)$ предскажите вид импульсного распределения для краев зон. Чем (и почему) оно отличается внутри разрешенных зон от $|\phi_n(k)|^2$ в случае конечного числа одинаковых ям? Где находится квазиимпульс на графике импульсного распределения в случае периодического поля.

Изобразите $qa(E)$ – зависимость квазиимпульса от энергии (закон дисперсии). Как определяются по закону дисперсии средняя скорость и эффективная масса частицы? Как они меняются с ростом номера разрешенной зоны и внутри зон? Сформируйте волновой пакет из состояний в разрешенной зоне и сопоставьте направление движения максимума $|\Psi(x)|^2$ с номером зоны, направлением квазиимпульса, положением основного пика импульса и направлением средней скорости.

14.2 Несколько ям на периоде

Задайте вместо одной две (потом три) одинаковые прямоугольные ямы на периоде и объясните форму закона дисперсии, посмотрите, как изменится импульсное распределение для краев зоны и его поведение с изменением E внутри зон. Рассмотрите и объясните форму и движение волнового пакета, сформированного в таком же окне энергий, как для одной ямы на периоде. Что произойдет с разрешенными зонами, если слегка изменить потенциал на каком-либо отрезке или ширину этого отрезка? Меняя это отклонение в противоположные стороны задайте соответственно начальный и конечный потенциал, постройте и объясните зависимость $E_n(z)$.