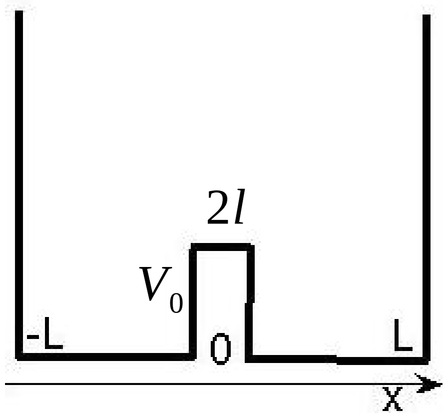
ქვანტურ-მექანიკური ამოცანები

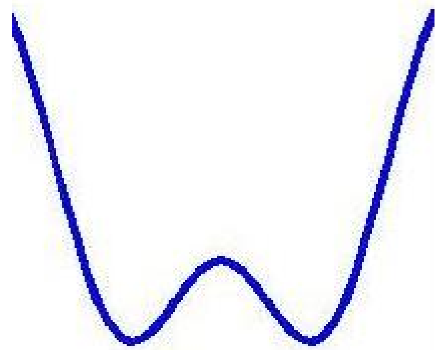
რაბის ოსცილაციები ორორმოიან პოტენციალში

დავიწყოთ ქვანტური მექანიკის ძირითადი განტოლებიდან. შრედინგერის განტოლებას $V(x,t)$ პოტენციალში მოთავსებული ნაწილაკისთვის კარგად ცნობილი ფორმა აქვს:

$$i\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}-V(x,t)\Psi=0 \qquad (1)$$

სადაც $V(x,t)$-ს აქ და ქვემოთ განვიხილავთ როგორც უსასრულო ორორმოიან პოტენციალს (კვადრატულს ან ჰარმონიულს) როგორც ნახაზზეა მოცემული იმ შემთხვევისათვის, როცა პოტენციალი მხოლოდ კოორდინატაზეა დამოკიდებული:





ჯერ-ჯერობით ჩვენ შემოვიფარგლებით კვადრატული ორ-ორმოიანი პოტენციალის შემთხვევით. რადგან ორმო უსასრულოა, ცხადია, რომ ტალღურ ფუნქციას ექნება შემდეგი სასაზღვრო მნიშვნელობები:

$$\Psi(x=-L)=\Psi(x=L)=0$$

როდესაც ბარიერი უსასრულოდ მაღალია, ამოცანა დაიყვანება ორ იზოლირებულ ერთორმოიან პოტენციალზე და მაშინ ამოხსნას მარცხენა ორმოსთვის აქვს შემდეგი მარტივი სახე:

$$\Psi(x,t)=Ae^{-i\omega t}\sin\left[n\pi\left(x+L\right)/\left(l-L\right)\right] \qquad \omega=\left[n\pi/(l-L)\right]^2 \qquad (2)$$

და ანალოგიური რამ მარჯვენა ორმოსთვის. როცა ბარიერის სიმაღლე სასრულია, მაშინაც ამოხსნა არაა ბევრად რთული:

$$\Psi(x,t)=Ae^{-i\omega t}\sin\left[k\left(x+L\right)\right] \qquad -L<x<-l$$

$$\Psi(x,t)=e^{-i\omega t}\left[ae^{\lambda x}+be^{-\lambda x}\right] \qquad -l<x<l$$

$$\Psi(x,t)=Be^{-i\omega t}\sin\left[k\left(x-L\right)\right] \qquad l<x<L$$

თუ გადავაბამთ ახლა ამოხსნებს და მათ წარმოებულებს წერტილებში $x=\pm l$, მაშინ მივიღებთ პირობებს $a^2=b^2$ და $A^2=B^2$. საბოლოოდ გვექნება, რომ არსებობს მხოლოდ

სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული ამოხსნები. სიმეტრიულ ამოხსნას აქვს სახე $\Psi(x,t)=e^{-i\omega_+ t}\Phi^+(x)$, სადაც:

$$\Phi^+(x)=A\sin[k(x+L)] \qquad -L<x<-l$$

$$\Phi^+(x)=a\cosh[\lambda x] \qquad -l<x<l$$

$$\Phi^+(x)=A\sin[k(L-x)] \qquad l<x<L$$

სადაც პარამეტრები ერთმანეთთან შემდეგი თანაფარდობებით არიან დაკავშირებული:

$$\omega_+=k^2,\ \lambda=\sqrt{\mathrm{V}_0-k^2},\ \mathrm{ctg}[k(L-l)]=\lambda\tanh[\lambda l]/\mathrm{k},\quad \mathrm{A}\sin[k(L-l)]=a\cosh[\lambda l]$$

ხოლო ანტისიმეტრიულ ამონახსნას შემდეგი სახე აქვს $\Psi(x,t)=e^{-i\omega_- t}\Phi^-(x)$, სადაც:

$$\Phi^-(x)=B\sin[k(x+L)] \qquad -L<x<-l$$

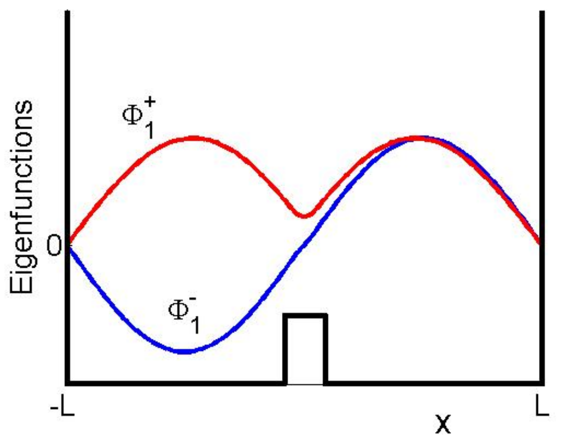
$$\Phi^-(x)=b\sinh[\lambda x] \qquad -l<x<l$$

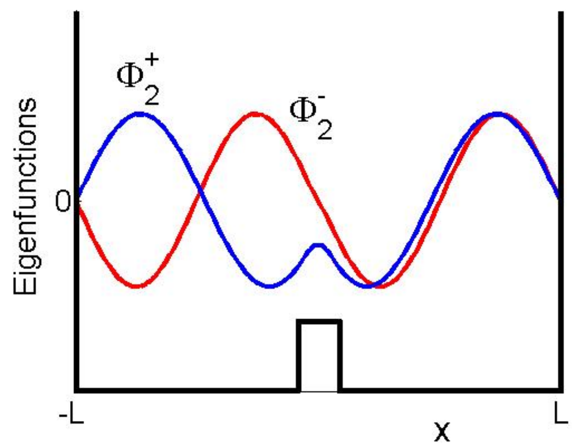
$$\Phi^-(x)=-B\sin[k(L-x)] \qquad l<x<L$$

და განსხვავებული პარამეტრებით ხასიათდება:

$$\omega_-=k^2,\ \lambda=\sqrt{\mathrm{V}_0-k^2},\quad \mathrm{tg}[k(L-l)]=k\tanh[\lambda l]/\lambda,\quad \mathrm{B}\sin[k(L-l)]=b\sinh[\lambda l].$$

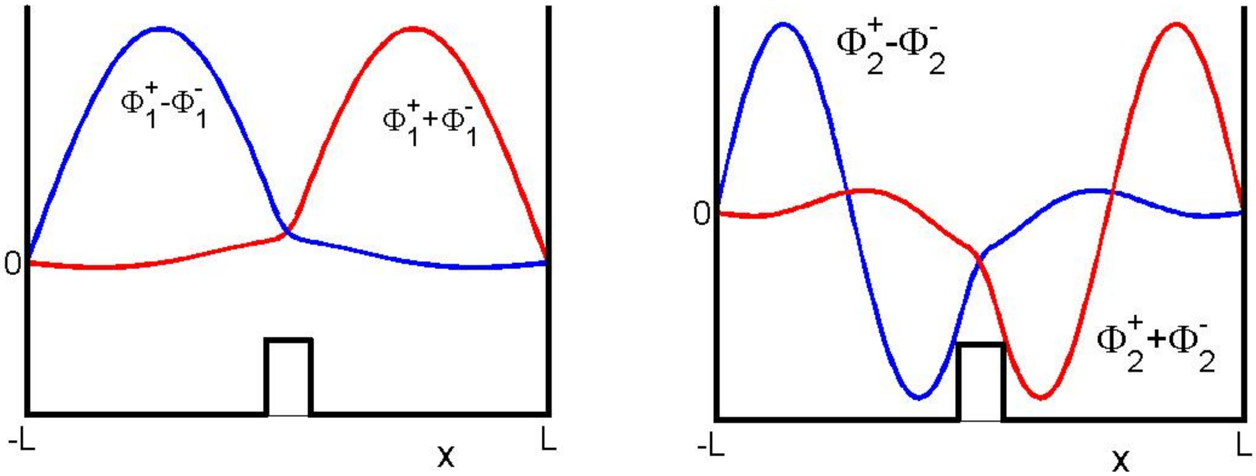
პირველი სიმეტრიული და ანტისიმეტრიული ამოხსნა მარცხენა ნახაზზეა მოცემული, ხოლო მარჯვენაზე შემდეგი ორი წყვილია გამოსახული უფრო დიდი ტალღური ვექტორი k-თი.





დარჩენილია თავისუფალი პარამეტრები - ამპლიტუდები A და B, რომლებიც ნებისმიერ მნიშვნელობას შეიძლება იღებდნენ. ზოგადობის შეუზღუდავად A და B ისეთი აიღება, რომ დაკმაყოფილდეს პირობები $\int_{-L}^{L}\left|\Phi^+(x)\right|^2=\int_{-L}^{L}\left|\Phi^-(x)\right|^2=1$. ესენი შრედინგერის განტოლების საკუთარი ფუნქციები არიან, რაც იმას ნიშნავს, რომ თუ დროის საწყის მომენტში რომელიმე ერთ პროფილს ავიღებთ, ეს ფორმა უცვლელი დარჩება დროის განმავლობაში. მაგრამ ყველა ეს განაწილება აღწერს ისეთ სიტუაციას, როცა ნაწილაკი ორივე ორმოში თანაბარი ალბათობითაა განაწილებული დროის ნებისმიერი მომენტისათვის. უფრო საინტერესო კი ისაა, როგორი იქნებოდა დინამიკა ნაწილაკისა, თუ დროის საწყის მომენტში ის უმეტესწილად ერთ-ერთ ორმოში იქნებოდა მოთავსებული. ამ დინამიკის აღსაწერად შევადგინოთ შემდეგი ფუნქციები: $\phi_1(x)=\Phi^+(x)+\Phi^-(x)$ და

$\phi_2(x)=\Phi^+(x)-\Phi^-(x)$, სადაც $\phi_1(x)$ და $\phi_2(x)$ უკვე აღარ არიან საკუთარი ფუნქციები, მაგრამ როგორც ნახაზებიდან ჩანს, ისინი ერთ ორმოში ლოკალიზებულ მდგომარეობებს აღწერენ. შევნიშნოთ, რომ უსასრულოდ დიდი ბარიერის დროს $\phi_1(x)$ და $\phi_2(x)$ უკვე შრედინგერის განტოლების საკუთარი ფუნქციები არიან და მათი ფორმა ემთხვევა (2) ამონახსნს.



ახლა წარმოვადგინოთ მთლიანი ტალღური ფუნქცია როგორც

$$\Psi(x,t)=\psi_1(t)\phi_1(x)+\psi_2(t)\phi_2(x) \tag{3}$$

ახლა ამას თუ ჩავსვამთ (1) –ში, გავამრავლებთ $\phi_1(x)$-ზე და გავაინტეგრებთ x-ით, მივიღებთ:

$$2i\frac{\partial\psi_1}{\partial t}=\varepsilon\psi_1+\mathrm{w}\psi_2$$

მეორეს მხრივ კი თუ ცავსვამთ (3)- ს (1)-ში, გავამრავლებთ $\phi_2(x)$-ზე და გავაინტეგრებთ x-ით, მივიღებთ:

$$2i\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=\varepsilon\psi_2+\mathrm{w}\psi_1$$

ამ ორი განტოლების გამოსაყვანად გამოყენებულია შემდეგი ტოლობები და განმარტებები:

$$\int_{-L}^{L}\phi_1^2dx=\int_{-L}^{L}\phi_2^2dx=2,\qquad \varepsilon=\int_{-L}^{L}\left[\phi_1V(x)\phi_1-\phi_1\frac{\partial^2\phi_1}{\partial x^2}\right]dx=\int_{-L}^{L}\left[\phi_2V(x)\phi_2-\phi_2\frac{\partial^2\phi_2}{\partial x^2}\right]dx$$

$$\int_{-L}^{L}\phi_1\phi_2dx=0,\qquad \mathrm{w}=\int_{-L}^{L}\left[\phi_1V(x)\phi_2-\phi_1\frac{\partial^2\phi_2}{\partial x^2}\right]dx=\int_{-L}^{L}\left[\phi_2V(x)\phi_1-\phi_2\frac{\partial^2\phi_1}{\partial x^2}\right]dx$$

ახლა თუ გავაკეთებთ მარტივ გარდაქმნებს $\psi_1\to\psi_1\exp(-i\varepsilon t/2)$, $\psi_2\to\psi_2\exp(-i\varepsilon t/2)$, მივიღებთ:

$$2i\frac{\partial\psi_1}{\partial t}=\mathrm{w}\psi_2 \qquad 2i\frac{\partial\psi_2}{\partial t}=\mathrm{w}\psi_1 \tag{4}$$

დავიწყოთ ამ განტოლებების ამოხსნა. პირველ ყოვლისა შევნიშნოთ, რომ სიდიდე $N_T=|\psi_1|^2+|\psi_2|^2$ დროში არ იცვლება, შემოვიტანოთ აღნოშვნები $z=\left(|\psi_1|^2-|\psi_2|^2\right)/N_T$, $\psi_1=|\psi_1|\exp(i\varphi_1)$, $\psi_2=|\psi_2|\exp(i\varphi_2)$ და $\varphi=\varphi_1-\varphi_2$. მაშინ (4) განტოლებები შემდეგნაირად გადაიწერება:

$$\frac{\partial z}{\partial t}=-\mathrm{w}\sqrt{1-z^2}\sin\varphi \qquad \frac{\partial\varphi}{\partial t}=\mathrm{w}\frac{z}{\sqrt{1-z^2}}\cos\varphi \tag{5}$$

გავაწარმოოთ პირველი განტოლება და მეორეს გათვალისწინებით საბოლოოდ მივიღებთ:

$$\frac{\partial^2 z}{\partial t^2}=-\mathrm{w}^2 z$$

რომელსაც აქვს ელემენტარული ოსცილატორული ამონახსნი $z=z_0\cos(\mathrm{w}t)$, სადაც, რა თქმა უნდა $z_0<1$. ეს არის ეგრეთ წოდებული რაბის ოსცილაციები.

ამ ლექციის საბოლოო მიზანია ჩავატაროთ კომპიუტერული სიმულაციები (4) განტოლებაზე და მერე შედარდეს შედეგები საწყის (1) განტოლებაზე წარმოებულ სიმულაციებთან.

(1) განტოლებაზე სიმულაციებისთვის დაგვჭირდება მისი დისკრეტიზაცია, კერძოდ მოვახდინოთ *x* ცვლადის დიკრეტიზაცია *x(n)=na*, სადაც *a* ბიჯის სიგრძეა. შევნიშნოთ, რომ მიახლოებით

$$\frac{\partial^2\Psi[t,x(n)]}{\partial x^2}=\frac{\Psi[t,a(n+1)]+\Psi[t,a(n-1)]-2\Psi[t,an]}{a^2}$$

და თუ აღვნიშნავთ $\Psi_n=\Psi(z,an)$, მივიღებთ *n* პირველი რიგის დიფერენციალური განტოლებების სისტემას:

$$ia^2\frac{\partial\Psi_n}{\partial t}+\left[\Psi_{n+1}+\Psi_{n-1}-2\Psi_n\right]-a^2V(t,an)\Psi_n=0$$

რომლის მსგავსი განტოლებების კომპიუტერული ამოხსნებიც წინა ლექციებში განვიხილეთ. ეს განტოლებები დაპროგრამებულია MATLAB-ის ფაილებში complex.m და complex1.m