



KURKIME ATEITĮ DRAUGE!

2004–2006 m. bendrojo programavimo dokumento 2 prioriteto 5 priemonė
„Žmogiškųjų išteklių kokybės gerinimas mokslinių tyrimų ir inovacijų srityje“

Projektas

**Fizinių mokslų II ir III studijų pakopų pertvarka, jas pritaikant prioritetinių
MTEP sričių vystymui**

Projekto numeris BPD2004-ESF-2.5.0-03-05/0012

Saulius Mickevičius

INTERAKTYVIŲJŲ KVANTINIŲ REIŠKINIŲ MODELIŲ KURSO

LABORATORINIAI DARBAI

Kaunas, 2009

Parengta Europos Sąjungos ir Lietuvos Respublikos lėšomis įgyvendinant projektą „Fizinių mokslų II ir III studijų pakopų pertvarka, jas pritaikant prioritetinių MTEP sričių vystymui“, Nr. BPD2004-ESF-2.5.0-03-05/0012.

Recenzavo: doc. Ramutis Kalinauskas

Svarstyta Vytauto Didžiojo universiteto Gamtos mokslų fakulteto tarybos posėdyje 2008-11-19 (protokolo Nr. 07-06) bei Gamtos mokslų fakulteto Fizikos katedros posėdyje 2009-10-30 (protokolo Nr. 10) ir rekomenduota išleisti elektroninę versiją.

TURINYS

IVADAS	4
1. Šviesos bangų paketas. Gauso bangų paketas	5
2. Stačiakampė potencialo duobė	15
3. Harmoninio osciliatoriaus potencialo duobė	25
4. Trimatis bangų paketas.....	36
5. Susietieji harmoniniai osciliatoriai	46
6. Vandenilio atomas	56
7. Vienmatė potencialinė sklaida.....	65
8. Trimatė potencialinė sklaida.....	78

IVADAS

Kvantinė mechanika yra fundamentali fizikos teorija, kurios idėjomis ir metodais grindžiami visi šiuolaikiniai fizikos mokslai. Vystantis mokslui, kuriant naujas technologijas, kvantinės mechanikos reikšmė ir jos pritaikymo sritys tikrai plėsis. Todėl yra svarbu tobulinti kvantinės mechanikos mokymo procesą, vystyti studentų fizikinę intuiciją ir sugebėjimą pritaikyti esamas žinias naujiems fizikiniams modeliams kurti ir uždaviniams spręsti.

Kompiuterinės įrangos panaudojimas kvantinės mechanikos mokymo procese yra visuotinai pripažintas. Abstrakčių, neklasikinėmis sąvokomis aprašomų kvantinių reiškinių tyrimas pasitelkiant kompiuterinį modeliavimą ne tik sudomina studentus savo vaizdumu, bet ir suteikia jiems gilesnį šių reiškinių supratimą bei jų skaitinės analizės patirtį.

„Interaktyviųjų kvantinių modelių kurso laboratoriniai darbai“ yra paruošti naudojant specializuotą programinį paketą *Interquanta*. Juo galima tyrinėti įvairių bangos paketų sklaidimą, potencialo duobių spektrą, susietuosius harmoninius osciliatorius, sklaidos uždavinius. Parengti laboratoriniai darbai apima visas temas, kurios dėstomos kvantinės mechanikos kurse.

1 LABORATORINIS DARBAS

Šviesos bangų paketas. Gauso bangų paketas

I. Darbo tikslai

- 1) Šviesos bangų paketo lauko stiprio kitimo laikui bėgant tyrimas.
- 2) Gauso bangų paketo tikimybės tankio, jo banginės funkcijos realiosios dalies ir menamosios dalies kitimo laikui bėgant tyrimas.

II. Teorinė dalis

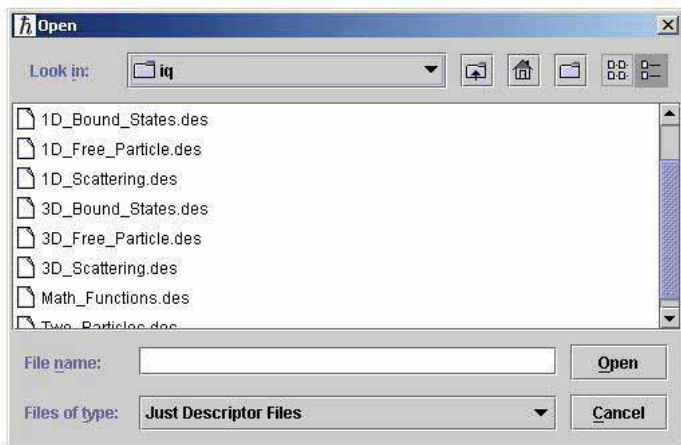
Įvadas

Laboratoriniai darbai paruošti naudojant *Interquanta* programinę paketą. Jis paleidžiamas kairiuoju pelės klavišu du kartus paspaudus kompiuterio darbalaukyje esantį programos simbolį – raidę $\hbar$. Tuomet ekrane pasirodo programos darbinis meniu, pavaizduotas 1.1 pav.



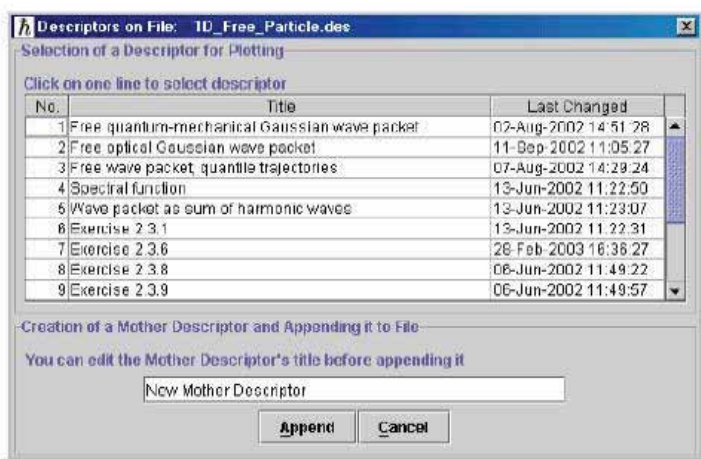
1.1 pav. Programos *Interquanta* darbinis meniu

Kiekviena užduotis, parengta naudojant *Interquanta* programinę paketą, turi jau nustatytą pradinį parametrų rinkinį, vadinamą descriptoriumi. Pradedant atlikti laboratorinį darbą, visų pirma turime patekti į to laboratorinio darbo aplinką. Todėl darbiname meniu nuspaužiate mygtuką **Descriptor File**. Tai padarius pasirodo lentelė, kurioje, pasirinkus atitinkamą failą, patenkama į norimą laboratorinio darbo aplinką (1.2 pav.).



1.2 pav. **Descriptor File** lentelė

Pasirinkę laboratorinio darbo aplinką, sugrįžtate į programos darbinį meniu (1.1 pav.). Nuspauskite mygtuką **Descriptor**. Tarkime, kad **Descriptor File** buvotė pasirinkę failą 1D_Free_Particle.des. Nuspaudus mygtuką **Descriptor**, ekrane pasirodys lentelė:



1.3 pav. Darbinė aplinka

Joje pasirinkite savo laboratorinio darbo užduoties deskriptoriaus numerį. Taip pateksite į savo laboratorinio darbo užduoties aplinką. Patekę į ją, išvysite brėžinį. Norėdami pakeisti brėžinio parametrus, kad jie atitiktų jūsų laboratorinio darbo užduoties sąlygą, brėžinyje nuspauskite mygtuką **Parameters**. Tuomet vėl išvysite lentelę, kurioje ir pakeisite norimus dydžius. Po to nuspauskite mygtuką **Plot** ir ekrane pasirodys naujas brėžinys su jūsų pakeitimais.

1. Šviesos bangų paketas

Šviesos bangų paketas – tai skirtingo dažnio ir amplitudės plokščiųjų bangų superpozicija. Jei stačiakampės koordinatų sistemos x ašies kryptis sutampa su bangų sklidimo kryptimi, tai y ašį visada galima nukreipti lygiagrečiai elektrinio lauko stipriui, o z ašį – lygiagrečiai magnetinio lauko stipriui. Tuo atveju elektrinio ir magnetinio laukų stiprių išraiškos yra:

$$E_y = E_0 \cos(\omega t - kx), \quad B_z = B_0 \cos(\omega t - kx), \quad (1.1)$$

$$E_x = E_z = 0, \quad B_x = B_y = 0. \quad (1.2)$$

Kampinį dažnį ω su bangos skaičiumi k sieja sąryšis:

$$\omega = c|k|. \quad (1.3)$$

Taškai, kuriuose lauko stipris yra didžiausias, randami iš kosinuso fazės kartotinumų 2π sąlygos:

$$\delta = \omega t - kx = 2l\pi; \quad (1.4)$$

kur $l = 0, 1, 2, \dots$.

Šie taškai juda pastoviu greičiu:

$$c = \frac{x}{t} = \frac{\omega}{k}. \quad (1.5)$$

Kadangi jis lygus tam tikros fazės greičiui, c vadinamas bangos faziiniu greičiu. Jei šviesos banga sklinda tuštumoje, jis nepriklauso nuo bangos ilgio. Jeigu k yra teigiamas, banga sklinda x ašies kryptimi, jei neigiamas – priešinga kryptimi.

Duotame erdvės taške laukų stipriai E ir B svyruoja laikui bėgant kampiniu dažniu ω . Svyravimo periodas

$$T = \frac{2\pi}{\omega}. \quad (1.6)$$

Duotuoju laiko momentu laukų stipriai erdvėje taip pat kinta periodiškai. Erdvinis periodas vadinamas bangos ilgiu:

$$\lambda = \frac{2\pi}{|k|}. \quad (1.7)$$

Pakanka nagrinėti tik elektrinį šviesos bangos lauką, nes magnetinio lauko kitimo pobūdis visiškai analogiškas. Skaičiavimai pasidaro paprastesni, kai pasinaudojame tuo, kad kosinusas ir sinusas yra atitinkamai lygūs eksponentinės funkcijos realiai ir menamai daliai:

$$\cos \beta + i \sin \beta = e^{i\beta}, \quad (1.8)$$

tai yra

$$\cos \beta = \operatorname{Re} e^{i\beta}, \quad \sin \beta = \operatorname{Im} e^{i\beta}. \quad (1.9)$$

Pati banga reiškiamą formule:

$$E = \operatorname{Re} E_c; \quad (1.10)$$

čia E_c – kompleksinis lauko stipris:

$$E_c = E_0 e^{-i(\omega t - kx)}. \quad (1.11)$$

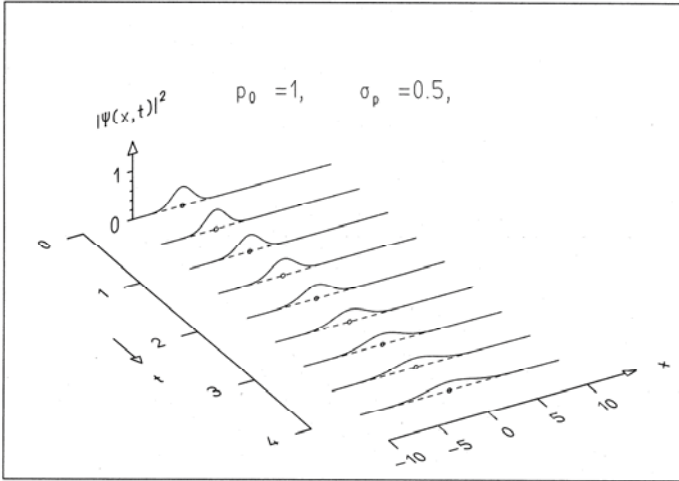
Elektromagnetinės bangos energijos tankis lygus lauko stiprio kvadratui, padaugintam iš elektrinės konstantos ε_0 :

$$\omega(x, t) = \varepsilon_0 E^2. \quad (1.12)$$

Kadangi plokščioji banga yra harmoninė, tai energijos tankis kinta du kartus sparčiau už lauko stiprį. Pagal apibrėžimą energijos tankis yra neneigiamas dydis. Todėl jis kinta apie nenulinę vidutinę vertę. Tą vidutinę vertę galima išreikšti kompleksiniu lauko stipriu šitaip:

$$\omega = \frac{\varepsilon_0}{2} |E_c|^2 = \frac{\varepsilon_0}{2} E_0^2. \quad (1.13)$$

Šviesos bangų paketo kitimas laikui bėgant parodytas 1.4 pav.



1.4 pav. Šviesos bangų paketo tikimybės tankių kitimas laikui bėgant

2. Gauso bangų paketas

Tikimybinis interpretavimas leidžia fotoną nusakyti banga. Dalelė, kurios rimties masė nelygi nuliui, negali judėti šviesos greičiu, todėl nereliatyvistinės energijos ir judesio kiekio sąryšis yra šitoks:

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad p = mv. \quad (1.14)$$

Plokščioji banga, gaunama naudojantis šiuo nereliatyvistiniu sąryšiu, vadinama de Broilio banga:

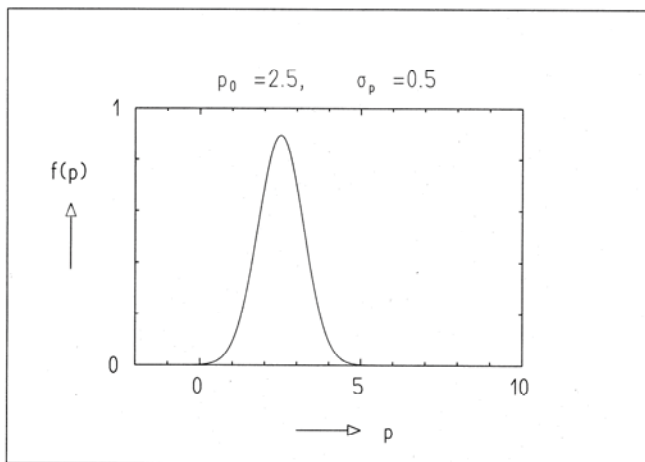
$$\psi_p(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right]. \quad (1.15)$$

Tos bangos fazinis greitis lygus:

$$v_p = \frac{E}{p} = \frac{p}{2m}. \quad (1.16)$$

Fazinis greitis nelygus dalelės greičiui $v = \frac{p}{m}$.

Harmoninės de Broilio bangos nėra lokalizuotos erdvėje ir todėl netinka dalelei nusakyti. Norint lokalizuoti dalelę erdvėje, tenka sudaryti bangų paketą. Pasirinkime Gauso funkcijos tipo spektrinę funkciją, pavaizduotą 1.5 pav.



1.5 pav. Gauso funkcijos tipo spektrinės funkcijos pavyzdys

Šitos funkcijos matematinė išraiška yra:

$$f(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_p} \exp\left[-\frac{(p-p_0)^2}{2\sigma_p^2}\right], \quad (1.17)$$

čia p_0 ir σ_p yra atitinkami spektrinės funkcijos vidutinis judesio kiekis ir plotis. Dabar de Broilio bangų paketą galima apibrėžti šitaip:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(p) \psi_p(x - x_0, t) dp. \quad (1.18)$$

Gauso paketo atveju integralą galima išreikštinai suintegruoti ir gauti šitokią banginės funkcijos išraišką:

$$\psi(x, t) = M(x, t)e^{i\phi(x, t)}. \quad (1.19)$$

Šioje išraiškoje eksponentinė funkcija išreiškia nešlio bangą, sparčiai kintančią erdvėje ir laike. Varpo pavidalo amplitudės funkcija

$$M(x, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi}\sqrt{\sigma_x}} \exp\left[-\frac{(x - x_0 - v_0 t)^2}{4\sigma_x^2}\right] \quad (1.20)$$

juda x ašies kryptimi grupiniu greičiu $v_0 = \frac{p_0}{m}$. Grupinis greitis (priešingai negu fazinis) sutampa su dalelės greičiu. Paketo išplitimą erdvėje apibūdina parametras:

$$\sigma_x^2 = \frac{\hbar^2}{2\sigma_p^2} \left(1 + \frac{4\sigma_p^4}{\hbar^2} \frac{t^2}{m}\right). \quad (1.21)$$

Ši formulė rodo, kad erdvinis paketo išplitimas laikui bėgant didėja. Toks reiškiny vadinamas dispersija.

Funkcija $\phi(x, t)$ apibrėžia nešlio bangos fazę:

$$\begin{aligned} \phi(x, t) = \frac{1}{\hbar} \left[p_0 + \frac{\sigma_p^2}{\sigma_x^2} \frac{v_0 t}{2p_0} (x - x_0 - v_0 t) \right] (x - x_0 - v_0 t) \\ + \frac{p_0}{2\hbar} v_0 t + \frac{\alpha}{2}, \end{aligned} \quad (1.22)$$

kur parametras α apibrėžiamas $tg\alpha = \frac{2\sigma_p^2}{\hbar m} t$.

Pagal banginės funkcijos tikimybinę interpretavimą banginės funkcijos modulio kvadratas yra lygus tikimybės rasti dalelę taške x laiko momentu t tankiui:

$$|\psi(x, t)|^2 = \rho(x, t). \quad (1.23)$$

Vadinasi, banginės funkcijos (1.19) modulio kvadratas lygus:

$$|\psi(x, t)|^2 = M^2(x, t) = \frac{1}{\sqrt[2]{2\pi}\sigma_x} \exp\left[-\frac{(x - x_0 - v_0 t)^2}{2\sigma_x^2}\right]. \quad (1.24)$$

Naudodamiesi pateiktomis išraiškomis galime tyrinėti Gauso bangų paketo išplitimo erdvėje reiškinį.

III. Darbo užduotys

Pirma dalis

1.1. Patyrinėkite šviesos bangų paketo kitimą laikui bėgant. Apskaičiuokite bangų paketo fazinius ir grupinį greičius. Pradėkite nuo 10 deskriptoriaus.

1.2. Patyrinėkite šviesos bangų paketo realiosios, menamosios dalių bei modulio kvadrato kitimą laikui bėgant. Pradėkite nuo 10 deskriptoriaus.

1.3. Patyrinėkite šviesos bangų paketo realiosios, menamosios dalių ir modulio kvadrato pokyčius, pradinį bangos skaičių k_0 padidinus du kartus. Kiek kartų pakito svyravimų periodas? Pradėkite nuo 10 deskriptoriaus.

1.4. Patyrinėkite šviesos bangų paketo formos pokyčius, bangos ilgį padidinus (sumažinus) 1,5 karto. Apskaičiuokite atitinkamus kampinius dažnius. Pradėkite nuo 10 deskriptoriaus.

1.5. Patyrinėkite šviesos bangų paketo realiosios, menamosios dalių ir modulio kvadrato pokyčius, svyravimų periodą padidinus atitinkamai 1,2 ir 1,5 karto. Koks yra fazinio greičio pokytis? Pradėkite nuo 10 deskriptoriaus.

Antra dalis

1.6. Nubrėžkite elektrono bangų paketo, kurio greitis 1 m/s ir plotis $\sigma_p = 0.5 \times 10^{-12}$ eVs/m, judančio iš pradinės padėties $x_0 = -2$ mm, realiąją, menamąją dalis bei modulio kvadratą. Pradėkite nuo 8 deskriptoriaus, kuriame yra parinkti teisingi laiko intervalai. Apskaičiuokite elektrono judesio kiekio momentą p_0 .

1.7. Nubrėžkite elektrono bangų paketo, kurio greitis 2.11 m/s ir plotis $\sigma_p = 0.75 p_0$, realiąją, menamąją dalis bei modulio kvadratą laiko intervale $0 \leq t \leq 2 \text{ ms}$, naudojant laiko intervalo žingsnį 0.25 ms . Apskaičiuokite elektrono judesio kiekio momentą p_0 . Paaiškinkite realiosios ir menamosios dalių formos kitimą laikui bėgant. Pradėkite nuo 9 deskriptoriaus.

1.8. Nubrėžkite elektrono, kurio greičiai $v_0 = 1 \text{ m/s}$ ir $v_0 = 3 \text{ m/s}$ bei pločiai $\sigma_p = 0.5 \times 10^{-12} \text{ eVs/m}$ ir $\sigma_p = 10^{-12} \text{ eVs/m}$, Gauso spektrines funkcijas. Pradėkite nuo 12 deskriptoriaus. Apskaičiuokite atitinkamus judesio kiekio momentus. Koks fizikinis dydis atidėtas absčių ašyje? Apskaičiuokite elektrono kinetines energijas.

1.9. Nubrėžkite protono, kurio greičiai $v_0 = 2 \text{ m/s}$ ir $v_0 = 4 \text{ m/s}$ bei pločiai $\sigma_p = 0.5 \times 10^{-9} \text{ eVs/m}$ ir $\sigma_p = 10^{-9} \text{ eVs/m}$, Gauso spektrines funkcijas. Pradėkite nuo 14 deskriptoriaus. Apskaičiuokite atitinkamus judesio kiekio momentus bei kinetines energijas.

1.10. Nubrėžkite protono, kurio kinetinės energijos $E = 1 \text{ keV}$ ir $E = 3 \text{ keV}$ bei pločiai $\sigma_p = 10^{-3} \text{ eVs/m}$ ir $\sigma_p = 1.5 \times 10^{-3} \text{ eVs/m}$, Gauso spektrines funkcijas. Pradėkite nuo 15 deskriptoriaus. Apskaičiuokite atitinkamus protono greičius.

IV. Rezultatų pateikimas

1. Pateikdami ataskaitą nurodykite: laboratorinio darbo pavadinimą, savo vardą ir pavardę; laboratorinio darbo tikslą.
2. Užrašykite laboratorinio darbo užduoties sąlygą.
3. Pavaizduokite atitinkamus šviesos bangų paketo ir Gauso bangų paketo pokyčius, kur reikia, apskaičiuokite nurodytus dydžius.
4. Pateikite laboratorinio darbo išvadą.
5. Pasiruoškite ginti laboratorinį darbą. Tam tikslui pasirenkite atsakyti į kontrolinius klausimus.

V. Kontroliniai klausimai

1. Šviesos bangų paketas, elektrinio ir magnetinio laukų stiprio išraiškos.
2. Kampinio dažnio, bangos skaičiaus, bangos ilgio apibrėžimai ir išraiškos.
3. Ką vadiname faziniu ir grupiniu greičiais?
4. Kompleksinis elektromagnetinio lauko stipris.
5. Elektromagnetinės bangos energijos tankis.
6. Paaškindite, kodėl laikui bėgant laisvasis bangų paketas išplinta.
7. Kaip judančio laisvojo banginio paketo dispersija priklauso nuo spektrinės funkcijos vidutinio judesio kiekio ir pločio?
8. Kokioms sąlygoms esant banginio paketo dispersija yra maža?
9. Kodėl skiriasi nurimusio ir judančio paketo banginės funkcijos realiosios ir menamosios dalių kitimas laikui bėgant?

VI. Literatūra

1. Brandt S., Dahmen H. D. (1993). *Iliustruotoji kvantinė mechanika*. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas. P. 9–17, 31–45.
2. Brandt S., Dahmen H. D., Stroth T. (2003). *Interactive Quantum Mechanics*. New York: Springer-Verlag. P. 8–23.
3. Deveikis A. (2000). *Kvantinės mechanikos kompiuteriniai laboratoriniai darbai*. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas. P. 19–21.

2 LABORATORINIS DARBAS

Stačiakampė potencialo duobė

I. Darbo tikslai

- 1) Ištirti stačiakampės potencialo duobės susietųjų būsenų spektro priklausomybę nuo duobės pločio ir gylio.
- 2) Ištirti baigtinio gylio vienmačių stačiakampių potencialo duobių sistemos susietųjų būsenų spektro priklausomybę nuo duobių formos ir atstumo tarp duobių.

II. Teorinė dalis

Panagrinėkime laisvąjį dalelės judėjimą (potencialas lygus nuliui) baigtinėje srityje tarp dviejų begalinio aukščio potencialo šuolių taškuose $x_1 = -\frac{d}{2}$ ir $x_2 = \frac{d}{2}$. Kadangi potencialas už šios srities yra begalinis, stacionariosios Šrėdingerio lygties sprendiniai turi būti tapačiai lygūs nuliui už srities ribų. Dėl tos priežasties judėjimo srityje galimos tik dviejų tipų tikrinės funkcijos:

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \cos\left(n\pi \frac{x}{d}\right), \quad n = 1, 3, 5, \quad (2.1)$$

arba

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{d}} \sin\left(n\pi \frac{x}{d}\right), \quad n = 2, 4, 6, \dots \quad (2.2)$$

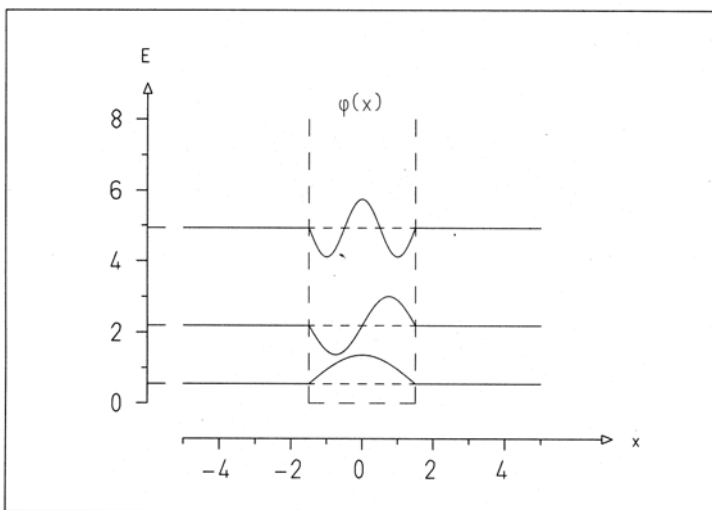
Šių susietųjų būsenų energijos

$$E_n = \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar n \pi}{d} \right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.3)$$

Tai galima patikrinti įrašius sprendinius į stacionariąją Šrėdingerio lygtį:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x), \quad (2.4)$$

galiojančią nulinio potencialo srityje. Parametras d nusako stačiakampės potencialo duobės plotį. 2.1 pav. vaizduojama trijų žemiausių būsenų tokioje duobėje tikrinės funkcijos.



2.1 pav. Be galo gilios stačiakampės potencialo duobės trijų žemiausių būsenų tikrinės funkcijos

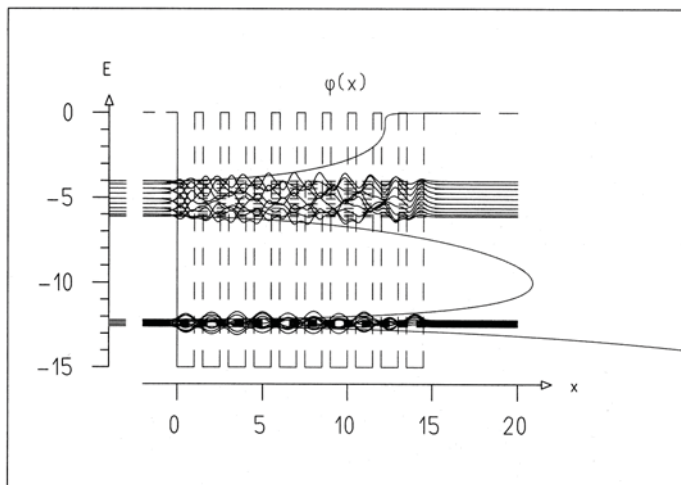
Žemiausioji (pagrindinė) būsena, kurios energija yra teigiama, turi teigiamą kinetinę energiją, nes potencinė energija yra lygi nuliui pagal apibrėžimą. Ji iš esmės skiriasi nuo klasikinio atvejo, kai mažiausios energijos būsena atitinka nurimusią būseną, kurios kinetinė energija lygi nuliui.

Kitų būsenų energijos proporcingos n^2 . Kvantinis skaičius n lygus banginės funkcijos mazgų skaičiui srityje $-\frac{d}{2} < x < \frac{d}{2}$ plus vienas; mazgai taškuose $x = \pm \frac{d}{2}$ neįskaitomi. Banginė funkcija gali

būti arba simetrinė, arba antisimetrinė koordinatės x ženklų pakeitimo atžvilgiu, priklausomai nuo n lyginumo. Simetrinės funkcijos, išreiškiamos kosinusais, vadinamos lyginio lyginumo funkcijomis, o antisimetrinės, išreiškiamos sinusais – nelyginio lyginumo funkcijomis. Akivaizdu, kad funkcija su lyginiu mazgų skaičiumi turi lyginį lyginumą, ir atvirkščiai.

Jei susiduriame su baigtinio gylio stačiakampe potencialo duobe, tai ji gali pasižymėti tik baigtiniu susietųjų būsenų skaičiumi. Duobei gilėjant, jis didėja. Skirtingai nei begalinio gylio duobių banginės funkcijos, baigtinio gylio duobių banginės funkcijos nelygios nuliui ir ne duobėje, tačiau jos eksponentiškai mažėja potencialo duobės kraštų srityse. Sparčiausiai mažėja pagrindinės būsenos funkcija. Duobės platiėjant, didėja ir susietųjų būsenų skaičius.

Kristalai pasižymi periodine struktūra, sukuriančia periodinį elektrosstatinio potencialo lauką. Tam tikru artėjimu jį galima aproksimuoti periodine vienodų potencialo duobių sistema. Periodinės stačiakampės potencialo duobių sistemos pavyzdys yra parodytas 2.2 pav.



2.2 pav. Periodinės stačiakampės potencialo duobių sistemos spektras

Kai tarp dviejų duobių yra tam tikras atstumas, tų duobių sistemoje atsiranda panašių tikrinių energijų verčių poros. Viena tokios poros tikrinė funkcija visada simetrinė, o antroji visada antisimetrinė. Lygindami duobių sistemos ir vienos duobės funkcijas, galime atskleisti jų ryšius. Dvigubos duobės simetrinė banginė funkcija gaunama simetriškai sujungus abiejų duobių funkcijas, o antisimetrinė – pakeičiant vienos iš jų ženklą jungimo metu. Ribiniu atveju, kai atstumas tarp duobių lygus nuliui, spektras ir tikrinės funkcijos sutampa su vienos dvigubo pločio duobės atitinkamais dydžiais.

Panagrinėsime banginių funkcijų porų kilmę ir savybes kiek smulkiau. Šrėdingerio lygtis, aprašanti duobių sistemą, yra:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x), \quad (2.5)$$

čia m – elektrono masė, E – susietosios būsenos energija. Stačiakampės potencialo duobių sistemos potencialas apibrėžiamas taip:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -\infty < x < -d_2, \\ -V_0, & -d_2 < x < -d_1, \\ 0, & -d_1 < x < d_1, \\ -V_0, & d_1 < x < d_2, \\ 0, & d_2 < x < \infty. \end{cases} \quad (2.6)$$

Mūsų atveju x ašis yra padalinta į penkias sritis. Kiekvienoje šių sričių potencialas yra pastovus. Potencialas simetriškas taškui $x = 0$, tai yra jis nekinta pakeitus x į $-x$. Pirmoje ir penktoje srityse banginės funkcijos turi eksponentiškai mažėti, kai $|x|$ vertės didelės. Antroje ir ketvirtoje srityse jos osciliuoja, nes kiekviena yra vaizduojama dviejų kompleksinių eksponentinių funkcijų suma.

Suminės banginės funkcijos pobūdį visiškai apibrėžia jos sandara trečioje srityje, apimančioje koordinačių pradžią. Toje srityje banginė funkcija yra realių eksponentinių funkcijų tiesinė kombinacija, kuri gali būti ir simetrinė (2.7), ir antisimetrinė (2.8):

$$\varphi_s(x) = A_s \frac{1}{2} (e^{\kappa_s x} + e^{-\kappa_s x}) = A_s ch(\kappa_s x), \quad (2.7)$$

$$\varphi_a(x) = A_a \frac{1}{2} (e^{\kappa_a x} - e^{-\kappa_a x}) = A_a sh(\kappa_a x). \quad (2.8)$$

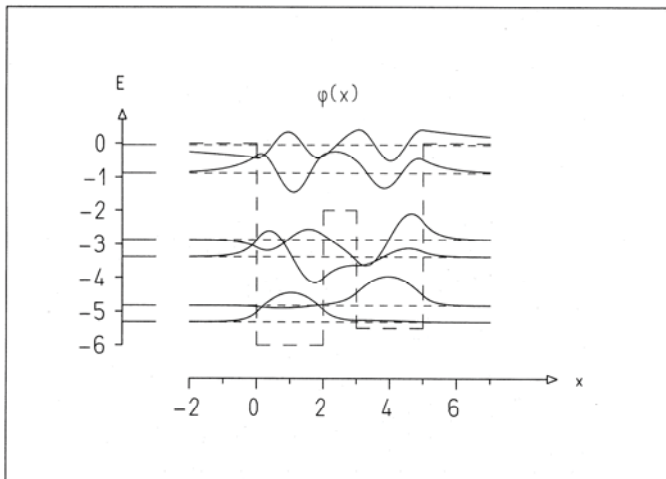
Koeficientai A_s ir A_a yra normos daugikliai. Parametrus κ_s ir κ_a apibrėžia šitokios išraiškos:

$$\kappa_s = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE_s}, \quad (2.9)$$

$$\kappa_a = \frac{1}{\hbar} \sqrt{-2mE_a}. \quad (2.10)$$

Dydžiai E_s ir E_a yra neigiamos simetrinio ir antisimetrinio sprendinių susietųjų būsenų energijos. Banginė funkcija trečioje srityje sujungia antrosios ir ketvirtosios sričių bangines funkcijas. Visa banginė funkcija yra simetrinė, jeigu ji simetrinė trečioje srityje.

Bendru atveju stačiakampę potencialo duobių sistemą sudarančių duobių gyliai ir pločiai gali būti nevienodi. 2.3 pav. pavaizduota dviejų skirtingo gylio potencialo duobių sistema.



2.3 pav. Dviejų skirtingo gylio potencialo duobių sistema

III. Darbo užduotys

2.1. Nubrėžkite be galo gilios stačiakampės potencialo duobės tikrines funkcijas ir tikimybių tankius energijų intervale $0 \leq E_i \leq 30$ eV. Duobės plotis $d = 3$ nm. Pradėkite nuo 9 deskriptoriaus.

2.2. Pavaizduokite elektrono, esančio be galo gilioje stačiakampėje potencialo duobėje, tikrines funkcijas, patenkančias į energijų intervalą $0 \leq E_i \leq 2$ eV. Duobės pločiai lygūs 3 nm ir 5 nm. Apskaičiuokite tikrines vertes, atitinkančias gautąsias tikrines funkcijas. Pradėkite nuo 10 deskriptoriaus.

2.3. Pavaizduokite elektrono, esančio be galo gilioje stačiakampėje potencialo duobėje, tikrines funkcijas ir jas atitinkančias tikrines vertes, patenkančias į energijų intervalą $0 \leq E_i \leq 20$ eV. Duobės plotis

$d = 3a$, kur $a = \frac{\hbar c}{\alpha m_e c^2} = 0.05292$ nm yra žemiausios vandenilio

atomo orbitos Boro spindulys. Apskaičiuokite elektrono, judančio Kulono potencialo $V(r) = -\frac{\alpha \hbar c}{r}$ lauke, potencinę energiją. Skai-

čiuodami laikykite, kad $r = a$. Palyginkite gautus rezultatus su elektrono ryšio energija vandenilio atome. Pradėkite nuo 12 deskriptoriaus.

2.4. Nubrėžkite baigtinio gylio stačiakampės potencialo duobės tikrines funkcijas ir tikimybių tankius. Duobės plotis $d = 4$ ir gylis $V_0 = -6$. Apskaičiuokite tikrines vertes, atitinkančias gautąsias tikrines funkcijas. Pradėkite nuo 15 deskriptoriaus.

2.5. Apskaičiuokite be galo gilios stačiakampės potencialo duobės pagrindinės būsenos tikrines vertes, esant duobės pločiams $d = 2, 4, 6$. Palyginkite gautas vertes su baigtinio gylio $V_0 = -6$ potencialo duobės pagrindinės būsenos tikrinėmis vertėmis. Pradėkite nuo 15 deskriptoriaus.

2.6. Nubrėžkite stačiakampės potencialo duobių sistemos tikrines funkcijas ir tikimybių tankius. Sistemos potencialas lygus

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ -4, & 0 \leq x < 1.625, \\ -1.33, & 1.625 \leq x < 1.875, \\ -4, & 1.875 \leq x < 3.5, \\ 0, & 3.5 \leq x. \end{cases}$$

Pradėkite nuo 16 deskriptoriaus. Kodėl dvi žemiausios tikrinės funkcijos yra arti viena kitos?

2.7. Nubrėžkite stačiakampės potencialo duobių sistemos tikrines funkcijas ir tikimybių tankius. Sistemos potencialas lygus

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ -3.5, & 0 \leq x < 1, \\ -1.2, & 1 \leq x < 2, \\ -3.5, & 2 \leq x < 3, \\ 0, & 3 \leq x. \end{cases}$$

Pradėkite nuo 16 deskriptoriaus. Kodėl trečioji tikrinė funkcija yra tiesi linija centrinėje srityje?

2.8. Nubrėžkite stačiakampės potencialo duobių sistemos tikrines funkcijas ir tikimybių tankius. Sistemos potencialas lygus

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ -5.72, & 0 \leq x < 1, \\ -1, & 1 \leq x < 1.5, \\ -4, & 1.5 \leq x < 3.5, \\ 0, & 3.5 \leq x. \end{cases}$$

Pradėkite nuo 16 deskriptoriaus. Paaiškinkite tikrinių funkcijų elgesį įvairiose potencialo srityse.

2.9. Nubrėžkite stačiakampės potencialo duobių sistemos tikrines funkcijas ir tikimybių tankius. Sistemos potencialas lygus

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ -4, & 0 \leq x < 1, \\ -1.33, & 1 \leq x < 2, \\ -4, & 2 \leq x < d, \\ 0, & d \leq x, \end{cases}$$

kur parametras d yra a) $d = 4$, b) $d = 4.5$, c) $d = 5$. Pradėkite nuo 16 deskriptoriaus. Paaiškinkite stačiakampės duobių sistemos susietųjų būsenų spektro pokyčius, didėjant parametrai d .

2.10. Nubrėžkite stačiakampės potencialo duobių sistemos tikrines funkcijas ir tikimybių tankius. Sistemos potencialas lygus

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ -1.25V_0, & 0 \leq x < 1.5, \\ -2V_0, & 1.5 \leq x < 2.5, \\ -1.5V_0, & 2.5 \leq x < 4.5, \\ 0, & 4.5 \leq x, \end{cases}$$

kur parametras V_0 yra a) $V_0 = 2$, b) $V_0 = 2.5$, c) $V_0 = 3$. Pradėkite nuo 16 deskriptoriaus. Paaiškinkite stačiakampės duobių sistemos susietųjų būsenų spektro pokyčius, didėjant parametrai V_0 .

IV. Rezultatų pateikimas

1. Pateikdami ataskaitą nurodykite: laboratorinio darbo pavadinimą; savo vardą ir pavardę; laboratorinio darbo tikslą.
2. Užrašykite laboratorinio darbo užduoties sąlygą.
3. Pavaizduokite atitinkamas stačiakampės potencialo duobės tikrines funkcijas ir tikimybių tankius, kur reikia, apskaičiuokite nurodytus dydžius.
4. Nubrėžkite atitinkamas stačiakampių potencialo duobių sistemos tikrines funkcijas ir tikimybių tankius, atsakykite į pateiktus klausimus.

5. Pateikite laboratorinio darbo išvadas.
6. Pasiruoškite ginti laboratorinį darbą. Tam tikslui pasirenkite atsakyti į kontrolinius klausimus.

V. Kontroliniai klausimai

1. Tikrinių funkcijų be galo gilioje stačiakampėje potencialo duobėje išraiškos.
2. Nuo ko priklauso stačiakampės potencialo duobės susietųjų būsenų energija?
3. Pagrindiniai be galo gilios ir baigtinio gylio stačiakampių potencialo duobių skirtumai.
4. Kaip kinta susietųjų būsenų padėtis be galo gilioje stačiakampėje potencialo duobėje, kintant duobės pločiui?
5. Kaip kinta susietųjų būsenų skaičius baigtinio gylio stačiakampėje potencialo duobėje, kintant duobės pločiui ir gyliui?
6. Kuo skiriasi periodinės stačiakampių potencialo duobių sistemos simetrinės ir antisimetrinės funkcijų grafikai?
7. Kodėl viena poros tikrinė funkcija yra simetrinė, o kita – antisimetrinė?
8. Kurios banginės funkcijos – simetrinės ar antisimetrinės – turi aukštesnę energiją? Kaip tai paaiškintumėte?
9. Kaip keičiasi stačiakampių potencialo duobių sistemos susietųjų būsenų porų energijų skirtumai, duobėms artėjant?
10. Koks ryšys tarp stačiakampių potencialo duobių sistemos tikrinių funkcijų ir vienos duobės tikrinių funkcijų?

VI. Literatūra

1. Brandt S., Dahmen H. D. (1993). *Iliustruotoji kvantinė mechanika*. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas. P. 83–85, 95–102.

2. Brandt S., Dahmen H. D., Stroh T. (2003). *Interactive Quantum Mechanics*. New York: Springer-Verlag. P. 24–25, 31–35.
3. Thaller B. (2000). *Visual Quantum Mechanics: Selected Topics with Computer-Generated Animations of Quantum-Mechanical Phenomena*. Springer. P. 85–97.

3 LABORATORINIS DARBAS

Harmoninio osciliatoriaus potencialo duobė

I. Darbo tikslai

- 1) Ištirti vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo duobės susietųjų būsenų spektrą ir Gauso bangų paketo, esančio vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo lauke, tikimybės tankio kitimą laikui bėgant.
- 2) Ištirti sferiškai simetrinio harmoninio osciliatoriaus susietųjų būsenų priklausomybes nuo kvantinių skaičių.

II. Teorinė dalis

1. Vienmatis harmoninis osciliatorius

Dalelę, judančią gilioje harmoninio osciliatoriaus potencialo duobėje, jėga veikia tik tais momentais, kai ji atsispindi nuo duobės šonų. Nuolat veikianti jėga $F(x)$ yra, pavyzdžiui, jėga, kuria spyruoklė veikia prie jos galo pritvirtintą svarelį:

$$F(x) = -kx, \quad k > 0. \quad (3.1)$$

Ji proporcinga poslinkiui x iš pusiausvyros padėties ir vadinama Huko jėga. Fizikinė sistema, kurioje dalelė juda veikiamą tokios jėgos, vadinama harmoniniu osciliatoriumi. Konstanta k nusako spyruoklės standumą. Spyruoklės sukaupta potencinė energija

$$V(x) = \frac{kx^2}{2}. \quad (3.2)$$

m masės klasikinė dalelė, veikiamą šios jėgos, atlieka harmoninius svyravimus, kurių dažnis

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (3.3)$$

todėl potencialą $V(x)$ galima išreikšti šitaip:

$$V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}. \quad (3.4)$$

Irašę šią išraišką į stacionariąją Šrėdingerio lygtį, gauname:

$$\left(-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x). \quad (3.5)$$

Vienmačio harmoninio osciliatoriaus tikrinės vertės lygios:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.6)$$

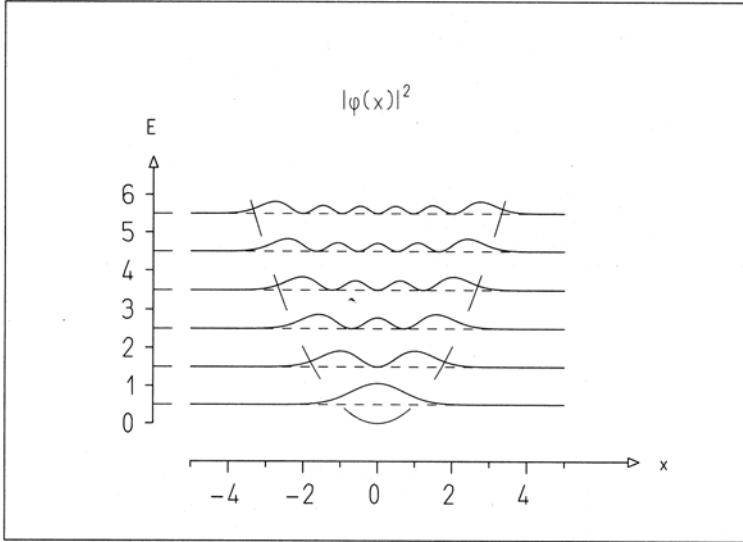
Mažiausios energijos $E_0 = \frac{\hbar \omega}{2}$ būseną yra pagrindinė būseną.

Aukštesniųjų būsenų energija E_n skiriasi nuo pagrindinės būsenos energijos dydžiu $\hbar \omega$.

Tikrinės funkcijos $\varphi_n(x)$, normuotos integruojant kintamuoju x , lygios:

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}, \quad (3.7)$$

kur $H_n(x)$ žymi n -tosios eilės Ermito polinomą. Vienmatės harmoninio osciliatoriaus potencialo duobės spektras pateiktas 3.1 pav.



3.1 pav. Vienmatės harmoninio osciliatoriaus potencialo duobės spektras

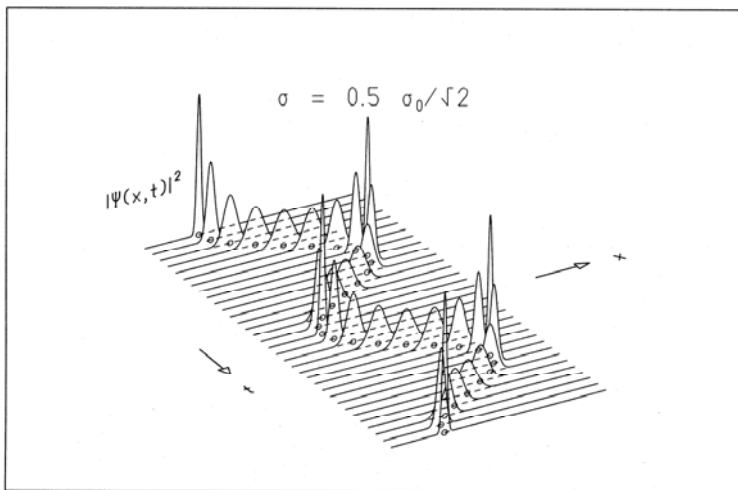
Panagrinėkime Gauso paketo judėjimą vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo lauke. Tegul laiko momentu $t = 0$ Gauso paketo centro padėtis yra $x = x_0 \neq 0$, jo judesio kiekis lygus nuliui, o plotis – σ . Tokio paketo tikimybės tankį galima išreikšti analizės pavidalu:

$$|\psi(x, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(t)} \exp\left[-\frac{(x - x_0 \cos \omega t)^2}{2\sigma^2(t)}\right], \quad (3.8)$$

kur $\sigma(t)$ yra Gauso bangų paketo tikimybės tankio pasiskirstymo kintamasis plotis, lygus

$$\sigma(t) = \frac{\sqrt{\sigma_0^4 \sin^2 \omega t + 4\sigma^4 \cos^2 \omega t}}{2\sigma}, \quad (3.9)$$

čia nedimensinis kintamasis $\sigma_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$. Gauso bangų paketo judėjimas vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo lauke parodytas 3.2 pav.



3.2 pav. Gauso bangų paketo judėjimas vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo lauke

Paketo centras svyruoja kaip atitinkama klasikinė dalelė. Paketo plotis kinta dvigubu dažniu: nuo $\sigma(0) = \sigma_0$ per ketvirtį periodo

$$\frac{T}{4} = \frac{\pi}{2\omega} \text{ padidėja iki didžiausios vertės } \sigma\left(\frac{T}{4}\right) = \frac{\sigma_0^2}{2\sigma}.$$

Smulkiau panagrinėkime svyravimus, vykstančius per pusę periodo. Posūkio taškuose ($t = 0$ ir $t = \frac{T}{2}$) banginė funkcija yra tik menama arba tik

reali, bet abiem atvejais išlaiko Gauso funkcijos pavidalą. Kitais laiko momentais atsiranda netaisyklinga struktūra, kurią nulemia osciliatoriaus funkcijų superpozicija. Atstumas tarp dviejų gretimų laisvosios harmoninės bangos mazgų yra lygus pusei bangos ilgio, di-

desnį bangos ilgį atitinka mažesnis judesio kiekis. Todėl didėjanti posūkio taškų aplinkoje atstumą tarp mazgų galima interpretuoti kaip artėjančios prie posūkio taško dalelės lėtėjimą.

Panagrinėkime situaciją, kai dalelė iš pradžių yra nurimusi osciliatoriaus duobės centre. Tegul dalelė, palyginti su pagrindinės būsenos plokšči, yra tiksliai lokalizuota, kai $\sigma < \frac{\sigma_0}{\sqrt{2}}$ (3.2 pav.). Koordinatės vidutinė vertė, kaip ir klasikinės dalelės, visą laiką išlieka duobės centre, taške $x = 0$. Paketo plotis kinta dvigubu dažniu tarp pagrindinės vertės σ ir didžiausios galimos $\frac{\sigma^2}{2\sigma}$.

Paketas, parodytas 3.2 pav., vadinamas spūdziaja būsena. Jo plotis kinta nuo mažiausio iki didžiausio vertės. Dėl šios savybės tokiais paketais naudojamos silpnų signalų matavimo technikoje.

2. Sferiškai simetrinis harmoninis osciliatorius

Harmoninio osciliatoriaus potencialas yra naudingas daugeliui branduolio teorijos modelinių skaičiavimų. Sferiškai simetrinio harmoninio osciliatoriaus potencinė energija

$$V(r) = \frac{k}{2} r^2 (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2). \quad (3.10)$$

To potencialo lauke judančios M masės dalelės stacionarioji Šrėdingerio lygtis yra tokia:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + \frac{k}{2} r^2 \right) \varphi(r) = E \varphi(r). \quad (3.11)$$

Šioje lygtyje atsiskiria Dekarto koordinatų sistemos kintamieji, nes potencialas yra lygus sumai narių, kurių kiekvienas priklauso tik nuo vienos iš koordinatų. Todėl stacionariąją funkciją galima išreikšti trijų funkcijų sandauga:

$$\varphi(r) = \varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2)\varphi_3(x_3), \quad (3.12)$$

o Šrėdingerio lygtis yra tapati trims nepriklausomoms vienmatėms lygtims:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx_i^2} + \frac{M}{2} \omega x_i^2 \right) \varphi_i(x_i) = E_i \varphi_i(x_i), \quad i = 1, 2, 3; \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{M}}. \quad (3.13)$$

Tikrinės vertės E_i lygios

$$E_i = E(n_i) = \left(n_i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \quad (3.14)$$

Visų trijų osciliatorių kvantiniai skaičiai n_i yra nepriklausomi tarpusavyje, o visa energija E išreiškiama šitaip:

$$E(n_1, n_2, n_3) = E(n_1) + E(n_2) + E(n_3) = \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right) \hbar \omega. \quad (3.15)$$

Trimačio harmoninio osciliatoriaus tikrinės funkcijos:

$$\varphi_{n_1, n_2, n_3}(x_1, x_2, x_3) = \varphi_{n_1}(x_1) \varphi_{n_2}(x_2) \varphi_{n_3}(x_3). \quad (3.16)$$

Atskyrus sferinės koordinačių sistemos kintamuosius trimatėje Šrėdingerio lygtyje galima gauti radikaliąją Šrėdingerio lygtį

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + V_{ef}(r) \right] R_{nl}(r) = E_n R_{nl}(r) \quad (3.17)$$

su efekciniu potencialu

$$V_{ef}(r) = \frac{\hbar}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{k}{2} r^2. \quad (3.18)$$

Jos sprendiniai

$$R_{nl}(r) = N_{nl} \left(\frac{r}{\sigma_0} \right)^l \exp \left(-\frac{r^2}{2\sigma_0^2} \right) L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}} \left(\frac{r^2}{\sigma_0^2} \right); \quad (3.19)$$

čia $L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{r^2}{\sigma_0^2}\right)$ yra jungtiniai Lagero daugianariai:

$$L_{n_r}^{l+\frac{1}{2}}(x) = \sum_{j=0}^{n_r} (-1)^j \binom{n_r + l + \frac{1}{2}}{n_r - j} \frac{x^j}{j!}, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (3.20)$$

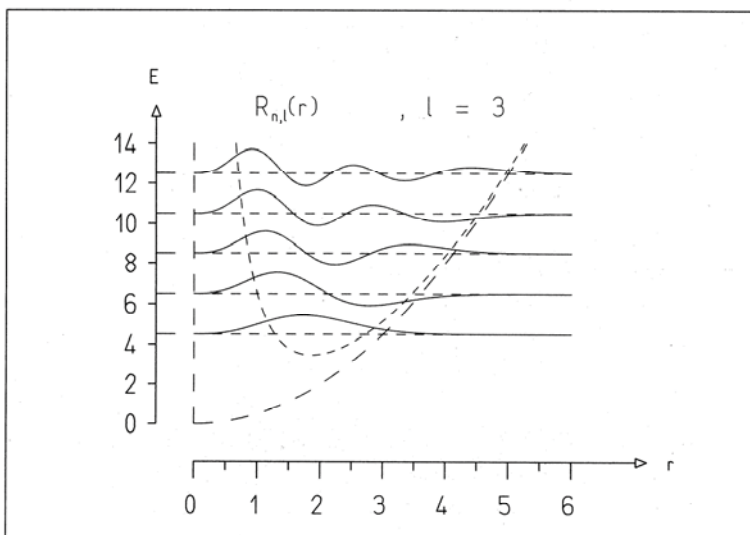
Normavimo konstantos:

$$N_{nl} = \sqrt{\frac{n_r! 2^{n+l}}{\sqrt{\pi} \sigma_0^3 [2(l + n_r) + 1]!}}. \quad (3.21)$$

Energijos tikrinių verčių išraiška:

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right) \hbar \omega, \quad n = 2n_r + l. \quad (3.22)$$

Sferiškai simetrinio harmoninio osciliatoriaus radikaliosios funkcijos parodytos 3.3 pav.



3.3 pav. Sferiškai simetrinio harmoninio osciliatoriaus radikaliosios funkcijos

III. Darbo užduotys

Pirma dalis

3.1. Nubrėžkite elektrono, esančio vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo duobėje, tikrines funkcijas ir tikimybių tankius. Elektrono harmoninio svyravimo dažniai yra: a) $\omega = 10^{15} \text{ s}^{-1}$, b) $\omega = 1.5 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ir c) $\omega = 2 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$. Apskaičiuokite atitinkamas standumo konstantas k . Pradėkite nuo 13 deskriptoriaus.

3.2. Nubrėžkite protono, esančio vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo duobėje, tikrines funkcijas ir tikimybių tankius, esant standumo konstantų vertėms $k = 0.1 \text{ eV/m}^2$ ir $k = 1 \text{ eV/m}^2$. Pradėkite nuo 14 deskriptoriaus. Apskaičiuokite atitinkamus harmoninio osciliatoriaus dažnius ω ir pagrindinės būsenos plotį σ_0 .

3.3. Nubrėžkite Gauso banginio paketo, judančio vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo lauke, realiąją, menamąją dalis bei modulio kvadratą. Pradiniu laiko momentu bangų paketas buvo nurimęs duobės centre, paketo plotis $\sigma = 1.75$. Pradėkite nuo 20 deskriptoriaus. Kodėl bangų paketo plotis periodiškai kinta?

3.4. Nubrėžkite Gauso banginio paketo, judančio vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo lauke, modulio kvadratą, esant skirtingiems pločiams: a) $\sigma = 0.5$, b) $\sigma = 1$ ir c) $\sigma = 2$. Pradiniu laiko momentu bangų paketas buvo nurimęs taške $x_0 = -6$. Harmoninio osciliatoriaus dažnis $\omega = \pi$. Pradėkite nuo 20 deskriptoriaus.

3.5. Pavaizduokite Gauso banginio paketo judėjimą vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo lauke laiko intervale $0 \leq t \leq 10$. Pradiniai dydžiai yra $x_0 = 2$, $p_0 = 5.184$ ir $\sigma_{x_0} = 0.5$. Pradėkite nuo 19 deskriptoriaus.

Antra dalis

3.6. Nubrėžkite trimačio harmoninio osciliatoriaus, kurio potencialas $V(r) = \frac{M\omega^2 r^2}{2}$, a) radikaliąją funkciją R_{nl} , b) rR_{nl} , c) R_{nl}^2 , d) $r^2 R_{nl}^2$

energijų intervale $0 \leq E \leq 15$, esant tokioms l vertėms: $l = 0, 1, 2, 3$. Osciliatoriaus dažnis $\omega = 1$. Pradėkite nuo 3 deskriptoriaus.

3.7. Pakartokite 3.6 užduotį, esant tokioms l vertėms: $l = 4, 5, 6, 7$. Pradėkite nuo 4 deskriptoriaus. Paaiškinkite spindulinių funkcijų priklausomybę nuo l .

3.8. Nubrėžkite trimačio harmoninio osciliatoriaus a) radikaliąją funkciją R_{nl} , b) rR_{nl} , c) R_{nl}^2 , d) $r^2 R_{nl}^2$ energijų intervale $0 \leq E \leq 15$, esant tokioms l vertėms: $l = 20, 21, 22, 23$. Osciliatoriaus dažnis $\omega = 1$. Pradėkite nuo 3 deskriptoriaus.

3.9. Nubrėžkite trimačio harmoninio osciliatoriaus a) radikaliąją funkciją R_{nl} , b) rR_{nl} , c) R_{nl}^2 , d) $r^2 R_{nl}^2$ energijų intervale $0 \leq E \leq 30$, esant $l = 0, 1$. Osciliatoriaus dažnis $\omega = 0.8$. Pradėkite nuo 4 deskriptoriaus. Apskaičiuokite trijų žemiausių lygmenų energijas.

3.10. Nubrėžkite trimačio harmoninio osciliatoriaus a) radikaliąją funkciją R_{nl} , b) rR_{nl} , c) R_{nl}^2 , d) $r^2 R_{nl}^2$ energijų intervale $0 \leq E \leq 15$, esant $l = 40, 41, 42, 43$. Osciliatoriaus dažnis $\omega = 1$. Pradėkite nuo 3 deskriptoriaus. Palyginkite gautas funkcijas su funkcijomis, gautomis 3.6 ir 3.8 užduotyse.

IV. Rezultatų pateikimas

1. Pateikdami ataskaitą nurodykite: laboratorinio darbo pavadinimą; savo vardą ir pavardę; laboratorinio darbo tikslą.
2. Užrašykite laboratorinio darbo užduoties sąlygą.

3. Nubrėžkite atitinkamas vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo duobės tikrines funkcijas, realiąsias, menamąsias dalis ir tikimybių tankius, kur reikia, apskaičiuokite nurodytus dydžius.
4. Nubrėžkite sferiškai simetrinio harmoninio osciliatoriaus spindulines funkcijas.
5. Pateikite laboratorinio darbo išvadas.
6. Pasiruoškite ginti laboratorinį darbą. Tam tikslui pasirenkite atsakyti į kontrolinius klausimus.

V. Kontroliniai klausimai

1. Tikrinių funkcijų ir tikrinių verčių vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo duobėje išraiškos.
2. Vienmačio harmoninio osciliatoriaus dažnis, standumo konstanta, plotis.
3. Paašškinkite, kodėl labiausiai nutolę susietųjų būsenų tikimybės tankių pūpsniai yra didžiausi?
4. Kaip keičiasi vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo duobės spektras, augant harmoninio osciliatoriaus dažnio ω vertei?
5. Gauso bangų paketo judėjimas vienmačio harmoninio osciliatoriaus potencialo lauke.
6. Kam lygi sferiškai simetrinio harmoninio osciliatoriaus potencialo energija?
7. Radikalioji Šrėdingerio lygtis.
8. Paašškinkite, kodėl labiausiai nutolęs funkcijos $r^2 R_{nl}^2$ pūpsnis yra didžiausias?
9. Kaip keičiasi funkcijų grafikai augant l vertėms, tačiau esant toms pačioms pagrindinių skaičių n vertėms?
10. Kaip keičiasi funkcijų grafikai augant pagrindinių skaičių n vertėms, tačiau esant toms pačioms l vertėms?

VI. Literatūra

1. Bandzaitis A., Grabauskas D. (1975). *Kvantinė mechanika*. Vilnius: Mokslas. P. 110–115.
2. Brandt S., Dahmen H. D. (1993). *Iliustruotoji kvantinė mechanika*. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas. P. 87–95.
3. Brandt S., Dahmen H. D., Stroh T. (2003). *Interactive Quantum Mechanics*. New York: Springer-Verlag. P. 35–39.
4. Thaller B. (2000). *Visual Quantum Mechanics: Selected Topics with Computer-Generated Animations of Quantum-Mechanical Phenomena*. Springer. P. 103–118.

4 LABORATORINIS DARBAS

Trimatis bangų paketas

I. Darbo tikslai

- 1) Ištirti trimačio bangų paketo išplitimą erdvėje laikui bėgant.
- 2) Ištirti sferinių harmonikų priklausomybę nuo kvantinių skaičių.

II. Teorinė dalis

Kvantinėje mechanikoje, kaip ir klasikinėje, dalelės padėtį trimatėje erdvėje apibūdina trys spindulio vektoriaus komponentės $\vec{r}(x, y, z)$. Trimis komponentėmis apibrėžiamas ir judesio kiekio operatorius $\vec{p}(\vec{p}_x, \vec{p}_y, \vec{p}_z)$. Kiekviena judesio kiekio operatoriaus komponentė yra lygi:

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (4.1)$$

Judesio kiekio operatorius vektorius

$$\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \frac{\hbar}{i} \nabla \quad (4.2)$$

reiškiamas diferencialiniu operatoriumi ∇ (nabla), padaugintu iš $\frac{\hbar}{i}$.

Trimatė stacionarioji plokščioji banga

$$\begin{aligned} \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_x x\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_y y\right) \times \\ &\times \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p_z z\right) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right); \end{aligned} \quad (4.3)$$

čia $\vec{p} \vec{r} = p_x x + p_y y + p_z z$. Tai trijų vienmačių stacionariųjų bangų, judančių koordinačių ašių kryptimis, sandauga.

Paviršius yra statmenas bangos vektoriui

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}. \quad (4.4)$$

Bangos ilgis apibrėžiamas analogiškai kaip ir vienmačiu atveju:

$$\lambda = \frac{2\pi}{|\vec{k}|}. \quad (4.5)$$

Trimatė stacionarioji plokščioji banga yra trijų skirtingų operatorių tikrinė funkcija, nes

$$\begin{aligned} \hat{p}_x \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) &= p_x \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}), & \hat{p}_y \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) &= p_y \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}), \\ \hat{p}_z \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}) &= p_z \varphi_{\vec{p}}(\vec{r}). \end{aligned} \quad (4.6)$$

Skaičiai p_x , p_y , p_z vadinami trimatės plokščiosios bangos judesio kiekio tikrinėmis vertėmis.

Trimatė nuo laiko priklausanti banginė funkcija gaunama padauginus stacionariąją funkciją (4.3) iš laikinio fazinio daugiklio:

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) &= \frac{1}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E t\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \vec{p} \vec{r}\right) = \\ &= \psi_{p_x}(x, t) \psi_{p_y}(y, t) \psi_{p_z}(z, t). \end{aligned} \quad (4.7)$$

Nuo laiko priklausančią trimatės harmoninės bangos išraišką galima suskaidyti į tris vienmates bangas.

Laisvosios trimatės dalelės judėjimą nusako plokščiųjų bangų superpozicija, tačiau spektrinė funkcija yra sudėtingesnė:

$$f(\vec{p}) = f_x(p_x) f_y(p_y) f_z(p_z); \quad (4.8)$$

kur

$$f_a(p_a) = \frac{1}{\sqrt{\sigma_{p_a}} \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(p_a - p_{a0})^2}{4\sigma_{p_a}^2}\right], \quad a = x, y, z. \quad (4.9)$$

Tai trijų Gauso spektrinių funkcijų sandauga. Didžiausia jos vertė yra taške $(p_{x0}, p_{y0}, p_{z0}) = \vec{p}_0$. Funkcijų $\psi_{\vec{p}}(\vec{r} - \vec{r}_0, t)$ superpoziciją apibrėžia integralas:

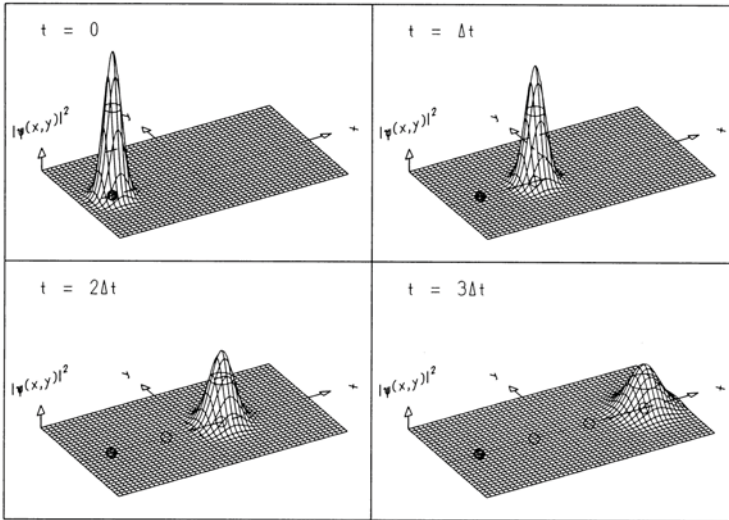
$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \int f(\vec{p}) \psi_{\vec{p}}(\vec{r} - \vec{r}_0, t) d^3 \vec{p}. \quad (4.10)$$

Jis nusako bangų paketo, pradedančio judėti momentu $t=0$ iš taško $\vec{r}_0$ ir turinčio vidutinį judesio kiekį $\vec{p}_0$, judėjimą. Kadangi abi poinTEGRALINĖS funkcijos $f(\vec{p})$ ir $\psi_{\vec{p}}(\vec{r} - \vec{r}_0, t)$ yra reiškiamos trijų dauginamųjų, priklausančių nuo skirtingų kintamųjų, sandauga, tai integralą galima išreikšti trijų narių sandauga:

$$\psi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = M_x(x, t) e^{i\phi_x(x, t)} M_y(y, t) e^{i\phi_y(y, t)} M_z(z, t) e^{i\phi_z(z, t)}. \quad (4.11)$$

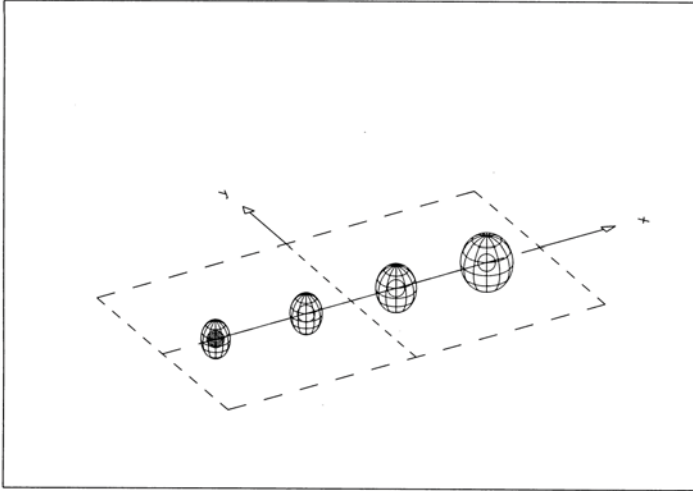
Kiekvieno nario išraiška analogiška vienmačio bangų paketo išraiškai.

4.1 pav. parodytas tikimybės pasiskirstymas $|\psi(x, y, t)|^2$, kai bangų paketas juda (x, y) plokštumoje ($z = 0$), keturiais laiko momentais.



4.1 pav. Tikimybės pasiskirstymas $|\psi(x, y, t)|^2$, kai bangų paketas juda (x, y) plokštumoje ($z = 0$), keturiais laiko momentais. Taškai plokštumoje žymi atitinkamas klasikinės dalelės padėtis. Šis tikimybės pasiskirstymas yra dvimatė Gauso funkcija, išplintanti laikui bėgant.

Trimatį Gauso bangų paketą visiškai apibūdina kovariacijos elipsoidas. Elipsoidai, atitinkantys keturis skirtingus laiko momentus, parodyti 4.2 pav.



4.2 pav. Gauso bangų paketo kovariacijos elipsoidai, atitinkantys keturis skirtingus laiko momentus

Trimatį judėjimą apibūdina judesio kiekio momentas $\hat{\vec{L}}$. Tačiau judesio kiekio momento komponentės $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ nekomutuoja tarpusavyje, taigi vienos komponentės operatoriaus tikrinė funkcija negali tuo pat metu būti kitos komponentės operatoriaus tikrinė funkcija. Tačiau judesio kiekio momento operatoriaus vektoriaus kvadratas $\hat{\vec{L}}^2$ komutuoja su bet kuria iš šių komponentių. Jo išraiška sferinėje koordinatinių sistemoje yra:

$$\hat{\vec{L}}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right], \quad (4.12)$$

čia ϑ yra polinis kampas, o ϕ – azimutas. Operatoriaus $\hat{\vec{L}}^2$ tikrinių verčių lygtis:

$$\hat{L}^2 Y_{lm}(\vartheta, \phi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}(\vartheta, \phi). \quad (4.13)$$

Operatoriaus tikrinės funkcijos $Y_{lm}(\vartheta, \phi)$ yra vadinamos sferinėmis harmonikomis. Jos priklauso nuo dviejų kvantinių skaičių: judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus l , kuris gali įgyti tik sveikąsias neneigiamas vertes $l = 0, 1, 2, \dots$, ir magnetinio kvantinio skaičiaus m , įgyjančio tik sveikąsias vertes intervale $-l \leq m \leq l$.

Sferines harmonikas galima išreikšti per jungtines Ležandro funkcijas $P_l^m(\cos \vartheta)$:

$$Y_{lm}(\vartheta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\phi}. \quad (4.14)$$

Jungtinės Ležandro funkcijos yra reiškiamos Ležandro daugianariais šitokiu būdu:

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x). \quad (4.15)$$

Ležandro daugianariai apskaičiuojami naudojantis Rodrigeso formule:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} \left[(x^2 - 1)^l \right]. \quad (4.16)$$

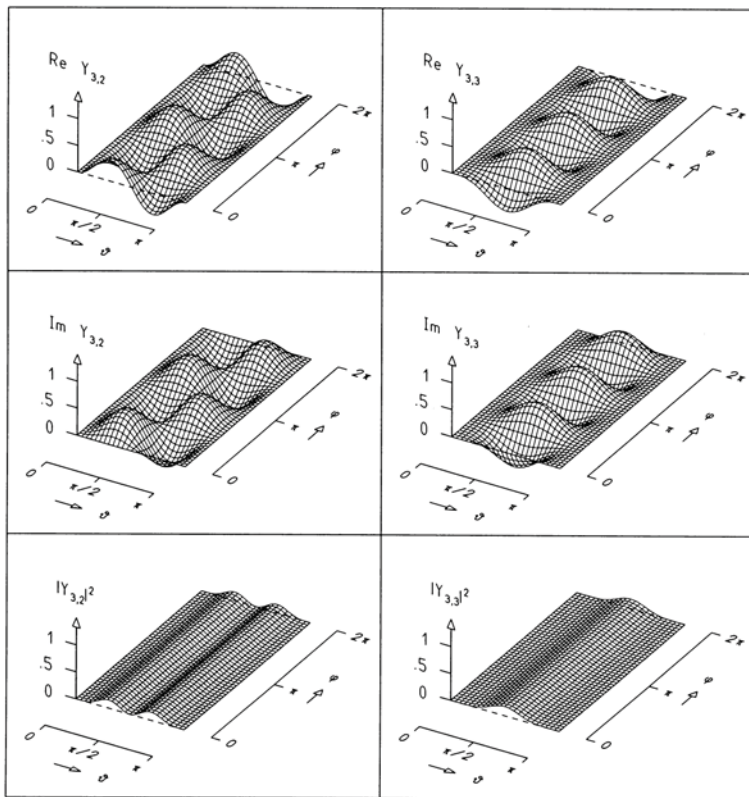
Jeigu magnetinis kvantinis skaičius m įgyja neigiamas vertes, tuomet sferinėms harmonikoms galioja sąryšis:

$$Y_{lm}(\vartheta, \phi) = (-1)^{|m|} Y_{l,|m|}^*(\vartheta, \phi), \quad m < 0. \quad (4.17)$$

Keletas pradinių sferinių harmonikų išraiškų:

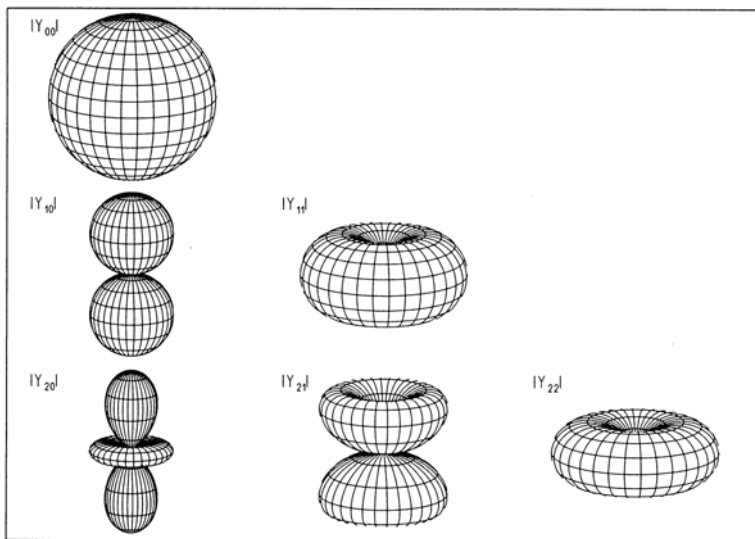
$$\begin{aligned} Y_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, & Y_{1,0} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta, \\ Y_{1,1} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta e^{i\phi}, & Y_{2,0} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1), \\ Y_{2,1} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta e^{i\phi}, & Y_{2,2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta e^{2i\phi}. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Nors Ležandro daugianariai ir jungtinės Ležandro funkcijos yra realiosios funkcijos, sferinės harmonikos bendru atveju yra kompleksinės funkcijos. 4.3 pav. pavaizduota $Y_{3,2}(\vartheta, \phi)$ ir $Y_{3,3}(\vartheta, \phi)$ realiosios ir menamosios dalys bei tų funkcijų absoliutinių verčių kvadratai.



4.3 pav. Sferinių harmonikų $Y_{3,2}(\vartheta, \phi)$ ir $Y_{3,3}(\vartheta, \phi)$ realiosios ir menamosios dalys bei tų funkcijų absoliutinių verčių kvadratai

Kadangi sferinės harmonikos priklauso nuo dviejų kampų, jas galima vaizduoti sferinėje koordinačių sistemoje. Tie atvaizdai pateikti 4.4 pav.



4.4 pav. Sferinių harmonikų absoliutinių verčių kvadratų atvaizdai sferinėje koordinatinių sistemoje

III. Darbo užduotys

4.1. Trimatis Gauso bangų paketas (x, y) plokštumoje yra pradinėje padėtyje $x_0 = -2$, $y_0 = -2$. Jo pradiniai greičiai $v_{x0} = 4$, $v_{y0} = 4$, pradiniai pločiai $\sigma_{x0} = 0.5$, $\sigma_{y0} = 0.5$. Laiko momentams $t = 0$ ir $t = 1$ nubrėžkite bangų paketo a) realiąją dalį, b) menamąją dalį, c) modulio kvadratą. Pradėkite nuo 4 deskriptoriaus. Apskaičiuokite pločius, kai laiko momentas $t = 1$.

4.2. Bangų paketas laiko momentu $t = 0$ yra nurimęs ir turi tokius pradinius dydžius $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $v_{x0} = 0$, $v_{y0} = 0$, $\sigma_{x0} = 1$, $\sigma_{y0} = 1$. Laiko intervalams $\Delta t = 0.5n$, kur $n = 3, 4, 5$, nubrėžkite bangų paketo a) realiąją dalį, b) menamąją dalį, c) modulio kvadratą. Pradėkite nuo 4 deskriptoriaus.

- 4.3. Nubrėžkite dalelės, kurios pradinės vertės yra $x_0 = -3$, $y_0 = -2$, $z_0 = -1$, $v_{x0} = 5$, $v_{y0} = 1.5$, $v_{z0} = 1$, $\sigma_{x0} = 1$, $\sigma_{y0} = 1.05$, $\sigma_{z0} = 2$, kovariacijos elipsoidus laiko momentais $t = 0, 1, 2$. Pradėkite nuo 5 deskriptoriaus. Apskaičiuokite klasikinės dalelės, turinčios tokias pat vertes, judesio kiekio momentus.
- 4.4. Nubrėžkite dalelės, kurios pradinės vertės yra $x_0 = -5$, $y_0 = -2$, $z_0 = -1$, $v_{x0} = 5$, $v_{y0} = 1.5$, $v_{z0} = 1$, $\sigma_{x0} = 1.8$, $\sigma_{y0} = 1.5$, $\sigma_{z0} = 1$, kovariacijos elipsoidus laiko momentais $t = 0, 1, 2$. Pradėkite nuo 5 deskriptoriaus. Palyginkite gautus kovariacijos elipsoidus su elipsoidais, gautais 4.3 užduotyje.
- 4.5. Nubrėžkite nurimusio sferinio bangų paketo kovariacijos elipsoidus keturiais laiko momentais $t = 0, 0.2, 0.4, 0.6$. Paketo pločiai lygūs $\sigma_{x0} = \sigma_{y0} = \sigma_{z0} = 0.2$. Pradėkite nuo 5 deskriptoriaus. Paaiškinkite elipsoidų formos kitimą laikui bėgant.
- 4.6. Nubrėžkite Ležandro daugianarius $P_l(x)$, esant atitinkamoms l vėrtėms: a) $l = 9, 10, 11, 12$, b) $l = 13, 14, 15, 16$, c) $l = 20, 21, 22, 23$. Grafičius pateikite 2×2 formatu. Pradėkite nuo 3 deskriptoriaus. Kiek nulių turi polinamai?
- 4.7. Nubrėžkite jungtines Ležandro funkcijas $P_l^m(x)$, esant atitinkamoms l ir m vėrtėms: a) $l = 4, m = 0, \dots, l$, b) $l = 7, m = 0, \dots, l$. Grafičius pateikite 4×4 formatu. Pradėkite nuo 4 deskriptoriaus. Kiek nulių turi funkcijos $P_l^m(x)$?
- 4.8. Nubrėžkite sferinių harmonikų realiąsias ir menamąsias dalis bei absoliutinių vėrčių kvadratus, esant $l = 2$ ir $m = 0, 1, 2$. Pradėkite nuo 6 deskriptoriaus. Kiek nulių turi sferinės harmonikos?
- 4.9. Nubrėžkite sferinių harmonikų absoliutinių vėrčių kvadratus sferinėje koordinačių sistemoje, esant $l = 5, m = 0, \dots, l$. Pradėkite nuo 8 deskriptoriaus.

4.10. Nubrėžkite sferinių harmonikų absoliutinių verčių kvadratus sferinėje koordinatų sistemoje, esant $l = 7$, $m = 0, \dots, l$. Pradėkite nuo 9 deskriptoriaus.

IV. Rezultatų pateikimas

1. Pateikdami ataskaitą nurodykite: laboratorinio darbo pavadinimą; savo vardą ir pavardę; laboratorinio darbo tikslą.
2. Užrašykite laboratorinio darbo užduoties sąlygą.
3. Nubrėžkite trimačio bangų paketo realiąsias, menamąsias dalis, modulio kvadratus bei kovariacijos elipsoidus.
4. Nubrėžkite Ležandro polinomus, jungtines Ležandro funkcijas ir sferines harmonikas.
5. Pateikite laboratorinio darbo išvadas.
6. Pasiruoškite ginti laboratorinį darbą. Tam tikslui pasirenkite atsakyti į kontrolinius klausimus.

V. Kontroliniai klausimai

1. Kas apibūdina dalelės judėjimą trimatėje erdvėje?
2. Kaip išreiškiama trimatė stacionarioji plokščioji banga?
3. Kas nusako laisvosios trimatės dalelės judėjimą?
4. Ką apibūdina kovariacijos elipsoidas?
5. Vienmatis bangų paketas neišplinta erdvėje. Kodėl išplinta trimatis paketas?
6. Kodėl kvantinėje mechanikoje plačiau naudojamas ne judesio kiekio momento operatorius $\hat{L}$, o judesio kiekio momento operatoriaus vektoriaus kvadratas $\hat{L}^2$?
7. Kokios funkcijos yra tikrinės operatoriaus $\hat{L}^2$ funkcijos?

8. Ar sferinės harmonikos yra tikrinės operatorių $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ funkcijos?
9. Nuo kokių kvantinių skaičių priklauso sferinės harmonikos?
10. Kas nusako sferinių harmonikų nulių skaičių?

VI. Literatūra

1. Brandt S., Dahmen H. D. (1993). *Iliustruotoji kvantinė mechanika*. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas. P. 133–144.
2. Brandt S., Dahmen H. D., Stroh T. (2003). *Interactive Quantum Mechanics*. P. 107–123, 180–182. New York: Springer-Verlag.
3. Thaller B. (2000). *Visual Quantum Mechanics: Selected Topics with Computer-Generated Animations of Quantum-Mechanical Phenomena*. Springer. P. 103–118.

5 LABORATORINIS DARBAS

Susietieji harmoniniai osciliatoriai

I. Darbo tikslas

Ištirti dviejų susietųjų harmoninių osciliatorių tikimybės tankio priklausomybę nuo sistemos kvantinių skaičių ir koreliacijos koeficiento įtaką dviejų susietųjų harmoninių osciliatorių sistemai.

II. Teorinė dalis

Yra žinoma, kad pagrindinis kvantinės mechanikos dydis – banginė funkcija. Dviejų dalelių sistemą apibūdina banginė funkcija $\Psi(x_1, x_2, t)$, priklausanti nuo laiko ir abiejų dalelių erdvinio koordinatų. Jos modulio kvadratas $|\Psi(x_1, x_2, t)|^2$ yra bendrasis tikimybės tankis. Dalelės vadinamos skirtingomis, jei skiriasi jų masė, krūvis arba kitos charakteristikos. Jeigu visos jų charakteristikos vienodos, dalelės vadinamos tapačiomis. Kai dalelės yra skirtingos, tai dydis

$$|\Psi(x_1, x_2, t)|^2 dx_1 dx_2 \quad (5.1)$$

nusako tikimybę laiko momentu t rasti pirmąją dalelę intervale dx_1 apie tašką x_1 , o antrąją dalelę – intervale dx_2 apie tašką x_2 . Dviejų dalelių sistemos bendrasis tikimybės tankis apibrėžiamas konkrečiu laiko momentu

$$\rho(x_1, x_2) \equiv \rho(x_1, x_2, t_0) = |\Psi(x_1, x_2, t_0)|^2. \quad (5.2)$$

Tuomet dydžiai

$$\begin{aligned} \rho_1(x_1) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x_1, x_2) dx_2 \\ \rho_2(x_2) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x_1, x_2) dx_1 \end{aligned} \quad (5.3)$$

yra ribiniai pasiskirstymai, nusakantys tikimybę rasti vieną iš dalelių, nepriklausomai, kur yra antroji dalelė.

Vienas paprasčiausių, turinčių praktinės reikšmės pavyzdžių yra dviejų skirtingų vienodos masės dalelių judėjimo išoriniame osciliatoriaus potencialo lauke tyrimas. Tegul išoriniai potencialai yra šito-
kio pavidalo:

$$V(x_1) = \frac{k}{2} x_1^2, \quad V(x_2) = \frac{k}{2} x_2^2, \quad k > 0. \quad (5.4)$$

Tegul dalelės sąveikauja harmonine jėga, kurios potencinė energija

$$V_c(x_1, x_2) = \frac{\kappa}{2} (x_1 - x_2)^2, \quad \kappa > 0. \quad (5.5)$$

Tuo atveju sistemos hamiltonianas yra lygus:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + V(x_1) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + V(x_2) + V_c(x_1, x_2). \quad (5.6)$$

Ši išraiška yra analogiška vienos dalelės atvejui, bet visa energija lygi ne vienos, o dviejų dalelių kinetinės ir potencinės energijų sumai.

Pradines sąlygas apibrėžia dalelių koordinačių vidutinės vertės laiko momentu $t = t_0$: $x_{10} = \langle x_1(t_0) \rangle$ ir $x_{20} = \langle x_2(t_0) \rangle$. Tarkime, kad abiejų dalelių pradines judesio kiekio vertės lygios nuliui. Lygtis turi be galo daug sprendinių, tenkinančių tokias pradines sąlygas, tačiau jeigu apsiribosime Gauso paketų forma pradiniu laiko momentu, gausime vienareikšmišką sprendinį. Vėlesniais laiko momentais pradinis paketas išlaikys Gauso paketų formą, tačiau atitinkamos dvimatės Gauso funkcijos parametrai taps priklausomi nuo laiko. Bendru atveju jis turi šitokią pavidalą:

$$\rho(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi\sigma_1\sigma_2\sqrt{1-c^2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2(1-c^2)} \left[\frac{(x_1 - \langle x_1 \rangle)^2}{\sigma_1^2} - \right. \right. \quad (5.7)$$

$$\left. \left. - 2c \frac{(x_1 - \langle x_1 \rangle)(x_2 - \langle x_2 \rangle)}{\sigma_1\sigma_2} + \frac{(x_2 - \langle x_2 \rangle)^2}{\sigma_2^2} \right] \right\}$$

Ta dvimatė Gauso funkcija priklauso nuo penkių parametrų. Tai – koordinatų vidurkiai $\langle x_1 \rangle$, $\langle x_2 \rangle$, pločiai σ_1 , σ_2 ir koreliacijos koeficientas c . Dvimatės Gauso funkcijos ribiniai pasiskirstymai yra vienmatės Gauso funkcijos:

$$\begin{aligned}\rho_1(x_1) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_1} \exp\left(-\frac{(x_1 - \langle x_1 \rangle)^2}{\sigma_1^2}\right), \\ \rho_2(x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_2} \exp\left(-\frac{(x_2 - \langle x_2 \rangle)^2}{\sigma_2^2}\right).\end{aligned}\tag{5.8}$$

Koordinatų vidurkiai atitinka dviejų dalelių klasikinės padėtis. Kai $c=0$, kintamieji x_1 ir x_2 nekoreliuoti. Tai reiškia, kad galiojantis ryšys $x_1 > \langle x_1 \rangle$ neleidžia teigti, ar $x_2 > \langle x_2 \rangle$, ar $x_2 < \langle x_2 \rangle$. Jei kintamieji koreliuoti, tai yra $c \neq 0$, situacija yra kitokia. Kai koreliacija teigiama ($c > 0$), tuomet, jei žinoma, kad $x_1 > \langle x_1 \rangle$, galime teigti, jog tikėtinesnis ryšys $x_2 > \langle x_2 \rangle$ negu $x_2 < \langle x_2 \rangle$. Jeigu koreliacija neigiama ($c < 0$), tuo atveju, jeigu žinoma, kad $x_1 > \langle x_1 \rangle$, labiau tikėtina, kad $x_2 < \langle x_2 \rangle$ negu $x_2 > \langle x_2 \rangle$. Koreliacijos dydį nusako c vertė, ji kinta šitaip: $-1 \leq c \leq 1$. Kai $c = \pm 1$, turime visiškos koreliacijos atvejį. Kai kintamieji nekoreliuoti, ryšys tarp bendrojo tikimybės tankio ir ribinių tikimybės tankių yra labai paprastas:

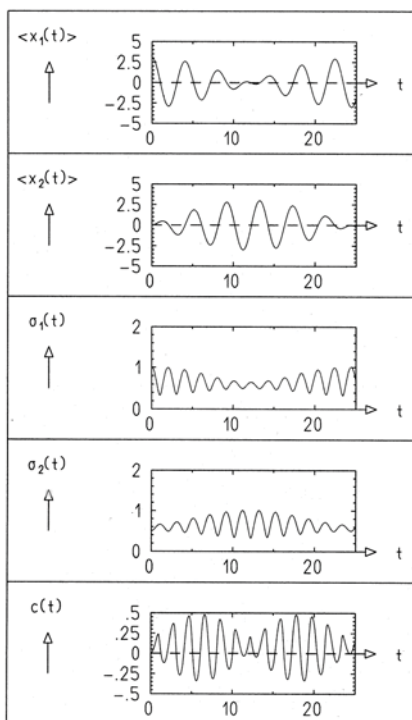
$$\rho(x_1, x_2) = \rho_1(x_1)\rho_2(x_2).\tag{5.9}$$

Pradėdami smulkiau nagrinėti susietųjų osciliatorių sistemą, turime atkreipti dėmesį į tokius faktus:

1. Vidurkių $\langle x_1(t) \rangle$ ir $\langle x_2(t) \rangle$ priklausomybę nuo laiko nulemia jų pradinės vertės, ta priklausomybė yra tapati atitinkamai klasikinių dalelių koordinatų priklausomybei. Ji nepriklauso nuo plokčių ir koreliacijos koeficiento pradinių verčių σ_{10} , σ_{20} ir c_0 .

2. Pločių $\sigma_1(t)$, $\sigma_2(t)$ ir koreliacijos koeficiento $c(t)$ priklausomybę nuo laiko sąlygoja jų pradinės vertės. Ji nepriklauso nuo dalelių pradinėjų padėčių x_{10} ir x_{20} .

Koordinatinių vidurkių $\langle x_1(t) \rangle$, $\langle x_2(t) \rangle$, pločių $\sigma_1(t)$, $\sigma_2(t)$ ir koreliacijos koeficiento $c(t)$ priklausomybės nuo laiko pateiktos 5.1 pav.



5.1 pav. Koordinatinių vidurkių $\langle x_1(t) \rangle$, $\langle x_2(t) \rangle$, pločių $\sigma_1(t)$, $\sigma_2(t)$ ir koreliacijos koeficiento $c(t)$ priklausomybės nuo laiko

Klasikinę dviejų susietųjų harmoninių osciliatorių sistemą apibūdina du būdingieji savieji virpesių dažniai. Tuos virpesius atskirai galima sužadinti parinkus tam tikras pradines sąlygas. Vienai savajai

virpesių rūšiai būdingas nurimęs sistemos masių centras. Tie virpesiai atsiranda, jei dalelės iš pradžių yra viena priešais kitą, tai yra $x_{10} = -x_{20}$. Tada masės centras atsiduria koordinatčių pradžioje ir lieka ten visą laiką nurimęs. Svyravimai vyksta tiksliai išilgai reliatyviosios koordinatės $r = x_2 - x_1$, o jų kampinis dažnis

$$\omega_r = \sqrt{\frac{k + 2\kappa}{m}}. \quad (5.10)$$

Kitos rūšies savieji virpesiai atsiranda, jei iš pradžių abi dalelės yra tame pačiame taške $x_{10} = x_{20} = R_0$, kuris kartu nurodo ir masės centro pradinę koordinatę. Tuo atveju dalelės nesąveikauja ir visą laiką juda kartu, todėl bet kuriuo momentu $x_1(t) = x_2(t)$. Dabar Huko jėga veikia tik masės centrą, ir jis svyruoja kampiniu dažniu

$$\omega_R = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (5.11)$$

Dviejų susietųjų harmoninių osciliatorių sistemos hamiltonianą, pateiktą (5.6), galima išreikšti dviejų narių suma:

$$H = H_R + H_r. \quad (5.12)$$

Pirmasis narys

$$H_R = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + kR^2 \quad (5.13)$$

nusako masės centro judėjimą, čia $R = \frac{1}{2}(x_1 + x_2)$ ir $M = 2m$ – sistemos masė.

Antrasis narys

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{k}{2} + \kappa \right) r^2 \quad (5.14)$$

nusako dalelių judėjimą viena kitos atžvilgiu, čia $r = x_2 - x_1$ ir $\mu = \frac{m}{2}$ – dalelių sistemos redukuotoji masė.

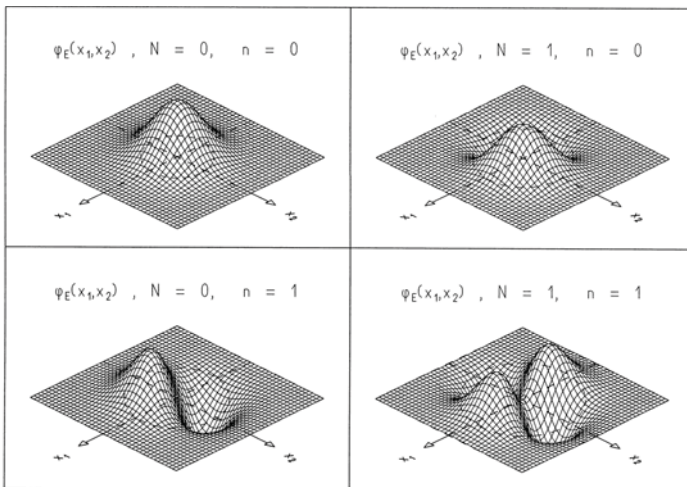
Kadangi hamiltoniano kintamieji atsiskiria, kiekvieną jo tikrinę funkciją galima išreikšti dviejų funkcijų, priklausančių nuo skirtingų kintamųjų, sandauga. Kiekviena iš jų yra paprastesnio hamiltoniano tikrinė funkcija:

$$\begin{aligned} H_R U_N(R) &= \left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_R U_N(R), \\ H_r u_n(r) &= \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_r u_n(r). \end{aligned} \quad (5.15)$$

Pirmasis jų nusako masės centro, o antrasis – santykinę dalelių judėjimą. Visa sistemos energija lygi abiejų hamiltonianų tikrinių verčių sumai:

$$E = \left(N + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_R + \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_r. \quad (5.16)$$

Taigi, šiuo atveju kiekvienas energijos spektro lygmuo apibūdinamas dviem nepriklausomais kvantiniais skaičiais – N (nusako masės centro sužadinimą) ir n (įvardija santykinio judėjimo būseną). Kai kurių mažiausių N ir n verčių atitinkamos tikrinės funkcijos pateiktos 5.2 pav.



5.2 pav. Kai kurių mažiausių N ir n verčių atitinkamos tikrinės funkcijos

III. Darbo užduotys

5.1. Nubrėžkite dviejų nesusietųjų harmoninių osciliatorių tikrines funkcijas duotai standumo konstantai $k = 2$ ir masei $m = 1$, esant keliems kvantinių skaičių rinkiniams: a) $N = 0, 1; n = 0, 1$, b) $N = 0, 1; n = 2, 3$, c) $N = 2, 3; n = 0, 1$, d) $N = 2, 3; n = 2, 3$. Pradėkite nuo 5 deskriptoriaus. Grafikus pateikite 2×2 formatu.

5.2. Nubrėžkite dviejų susietųjų harmoninių osciliatorių tikrines funkcijas duotoms standumo konstantoms $k = 1$ ir $\kappa = 2$, esant keliems kvantinių skaičių rinkiniams: a) $N = 0, 1; n = 0, 1$, b) $N = 0, 1; n = 2, 3$, c) $N = 2, 3; n = 0, 1$, d) $N = 2, 3; n = 2, 3$. Pradėkite nuo 5 deskriptoriaus. Grafikus pateikite 2×2 formatu.

5.3. Nubrėžkite dviejų susietųjų harmoninių osciliatorių tikimybių tankius duotiems kvantiniams skaičiams $N = 1, 2$ ir $n = 1, 2$. Osciliatorių standumo konstantos lygios $k = 2$ ir $\kappa = 5$. Pradėkite nuo 5 deskriptoriaus. Paaiškinkite tikimybių tankių priklausomybę nuo kvantinių skaičių N ir n .

5.4. Nubrėžkite dviejų susietųjų harmoninių osciliatorių tikimybių tankius duotoms standumo konstantoms $k = 1$ ir $\kappa = 4$, esant keliems kvantinių skaičių rinkiniams: a) $N = 2, 3; n = 0, 1$, b) $N = 2, 3; n = 2, 3$, c) $N = 4, 5; n = 0, 1$, d) $N = 4, 5; n = 2, 3$. Pradėkite nuo 5 deskriptoriaus. Apskaičiuokite pilnutines susietųjų harmoninių osciliatorių sistemos energijas.

5.5. Duota dviejų susietųjų harmoninių osciliatorių sistema su tokio-
mis standumo konstantų vertėmis: $k = 2$ ir $\kappa = 0.5$. Nubrėžkite ko-
ordinačių vidurkių $\langle x_1(t) \rangle$, $\langle x_2(t) \rangle$, pločių $\sigma_1(t)$, $\sigma_2(t)$ ir koreliaci-
jos koeficiento $c(t)$ priklausomybes nuo laiko. Pradiniu laiko mo-
mentu $t = 0$ šie dydžiai buvo lygūs: $\langle x_{10} \rangle = 3$, $\langle x_{20} \rangle = 0$,
 $\sigma_{10} = 1.01$, $\sigma_{20} = 0.5$, $c_0 = 0$. Paaiškinkite koordinačių vidurkių
 $\langle x_1(t) \rangle$ ir $\langle x_2(t) \rangle$ elgesį laikui bėgant. Pradėkite nuo 6 deskripto-

riaus. Kodėl laikui bėgant koreliacijos koeficientas $c(t)$ tampa nelygus nuliui?

5.6. Nubrėžkite dviejų susietųjų glaudžiai koreliuotų harmoninių osciliatorių sistemos koordinačių vidurkių $\langle x_1(t) \rangle$, $\langle x_2(t) \rangle$, pločių $\sigma_1(t)$, $\sigma_2(t)$ ir koreliacijos koeficiento $c(t)$ priklausomybes nuo laiko. Pradiniu laiko momentu $t = 0$ šie dydžiai buvo lygūs: $\langle x_{10} \rangle = 2$, $\langle x_{20} \rangle = 2$, $\sigma_{10} = 0.9$, $\sigma_{20} = 0.6$, $c_0 = 0.95$. Pradėkite nuo 6 deskriptoriaus. Paaiškinkite koordinačių vidurkių $\langle x_1(t) \rangle$ ir $\langle x_2(t) \rangle$ elgesį laikui bėgant.

5.7. Nubrėžkite dviejų nesusietųjų harmoninių osciliatorių tikimybių tankius $\rho_D(x_1, x_2)$ skirtingoms masės $m = 1$ dalelėms, kurių standumo konstanta $k = 2$. Pradiniu laiko momentu $t = 0$ koordinačių vidurkiai, pločiai ir koreliacijos koeficientas lygūs: $\langle x_{10} \rangle = -2$, $\langle x_{20} \rangle = 3$, $\sigma_{10} = 1$, $\sigma_{20} = 0.5$, $c_0 = -0.8$. Grafikus pateikite 2×2 formatu duotais laiko intervalais: $t_n = n\Delta t$, kur $n = 4, 5, 6, 7$, o $\Delta t = 0.501$. Pradėkite nuo 7 deskriptoriaus. Kodėl egzistuoja neigiama pradinė koreliacija?

5.8. Pakartokite 5.7 užduotį bozonų atveju.

5.9. Nubrėžkite dviejų susietųjų harmoninių osciliatorių tikimybių tankius $\rho_D(x_1, x_2)$ skirtingoms masės $m = 1$ dalelėms, kurių standumo konstantoms $k = 2$ ir $\kappa = 20$. Pradiniu laiko momentu $t = 0$ koordinačių vidurkiai, pločiai ir koreliacijos koeficientas lygūs: $\langle x_{10} \rangle = 3$, $\langle x_{20} \rangle = -3$, $\sigma_{10} = 1$, $\sigma_{20} = 0.5$, $c_0 = 0$. Grafikus pateikite 2×2 formatu duotais laiko intervalais: $t_n = n\Delta t$, kur $n = 4, 5, 6, 7$, o $\Delta t = 0.2$. Pradėkite nuo 7 deskriptoriaus.

5.10. Panagrinėkite dviejų skirtingų masės $m = 1$ dalelių ribinius pasiskirstymus. Dalelių standumo konstantos $k = 2$ ir $\kappa = 0.8$. Pradiniu laiko momentu dalelių parametrai yra: $\langle x_{10} \rangle = 3$, $\langle x_{20} \rangle = 0$,

$\sigma_{10} = 1$, $\sigma_{20} = 0.5$, $c_0 = 0$. a) Nubrėžkite pirmosios dalelės ribinį pasiskirstymą $\rho_{D_1}(x_1, t)$ laiko intervale $0 \leq t \leq 4$. b) Nubrėžkite antrosios dalelės ribinį pasiskirstymą $\rho_{D_2}(x_2, t)$ tame pačiame laiko intervale. Pradėkite nuo 9 deskriptoriaus.

IV. Rezultatų pateikimas

1. Pateikdami ataskaitą nurodykite: laboratorinio darbo pavadinimą; savo vardą ir pavardę; laboratorinio darbo tikslą.
2. Užrašykite laboratorinio darbo užduoties sąlygą.
3. Nubrėžkite susietųjų harmoninių osciliatorių potencialo duobės tikrines funkcijas, tikimybių tankius, koordinačių vidurkių pločių ir koreliacijos koeficiento priklausomybes nuo laiko.
4. Pateikite laboratorinio darbo išvadą.
5. Pasiruoškite ginti laboratorinį darbą. Tam tikslui pasirenkite atsakyti į kontrolinius klausimus.

V. Kontroliniai klausimai

1. Ką nusako tikimybės tankis?
2. Kokias daleles vadiname tapačiomis, kokias – skirtingomis?
3. Ką vadiname ribiniais pasiskirstymais?
4. Koks yra ryšys tarp bendrojo tikimybės tankio ir ribinių tikimybės tankių, kai kintamieji nekoreliuoti?
5. Kokie parametrai apibūdina dviejų dalelių sistemos bendrąjį tikimybės tankį?
6. Dviejų išorinių susietųjų harmoninių osciliatorių potencialų išraiškos.
7. Kaip koordinačių vidurkiai priklauso nuo koreliacijos koeficiento?

8. Kas lemia koordinačių vidurkių ir pločių priklausomybę nuo laiko?
9. Kas apibūdina klasikinę dviejų susietųjų harmoninių osciliatorių sistemą?
10. Kam lygi visa dviejų susietųjų harmoninių osciliatorių sistemos energija?

VI. Literatūra

1. Brandt S., Dahmen H. D. (1993). *Iliustruotoji kvantinė mechanika*. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas. P. 106–116.
2. Brandt S., Dahmen H. D., Stroh T. (2003). *Interactive Quantum Mechanics*. New York: Springer-Verlag. P. 91–101.
3. Thaller B. (2000). *Visual Quantum Mechanics: Selected Topics with Computer-Generated Animations of Quantum-Mechanical Phenomena*. Springer. P. 121–136.

6 LABORATORINIS DARBAS

Vandenilio atomas

I. Darbo tikslai

- 1) Vandenilio atomo radikaliosios Šrėdingerio lygties sprendinių bei tikimybės tankių priklausomybės nuo kvantinių skaičių tyrimas.
- 2) Lagero daugianarių priklausomybės nuo kvantinių skaičių tyrimas.

II. Teorinė dalis

Vandenilio atomas susideda iš protono ir vieno elektrono, skriejančio apie jį elektrinės jėgos lauke. Elektrono, kurio krūvis lygus $-e$, potencinę energiją protono (jo krūvis $+e$) lauke nusako protono kuriamas Kulono potencialas

$$U(r) = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}, \quad (6.1)$$

padaugintas iš elektrono krūvio:

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}. \quad (6.2)$$

Koeficientą $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ galima išreikšti dviejų svarbiausių gamtos konstantų – Planko konstantos ir šviesos greičio – sandauga:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = \alpha \hbar c, \quad \alpha \approx \frac{1}{137}. \quad (6.3)$$

Nedimensinis daugiklis α vadinamas smulkiosios struktūros konstanta. Vandenilio atomo stacionarioji Šrėdingerio lygtis:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + \hbar c \frac{\alpha}{r} \right) \varphi(r) = E \varphi(r), \quad (6.4)$$

čia M – elektrono masė. Šios lygties sprendinius galima išreikšti radikaliųjų banginių funkcijų $R_{nl}(r)$ ir sferinių harmonikų $Y_{lm}(\vartheta, \phi)$

sandauga:

$$\varphi(r) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \phi). \quad (6.5)$$

Tą išraišką įstatę į (6.4) lygtį, gauname vandenilio atomo radikaliąją Šrėdingerio lygtį:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + V_{ef}(r) \right] R_{nl}(r) = E_n R_{nl}(r). \quad (6.6)$$

Tai tikrinių verčių lygtis su tikrinėmis vertėmis E_n ir tikrinėmis funkcijomis $R_{nl}(r)$. Efektinis potencialas yra Kulono ir išcentrinio potencialų suma:

$$V_{ef}(r) = \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2} - \hbar c \frac{\alpha}{r}. \quad (6.7)$$

Tikrinės vertės priklauso tik nuo pagrindinio kvantinio skaičiaus n :

$$E_n = -\frac{1}{2} Mc^2 \frac{\alpha^2}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.8)$$

Jos sudaro begalinę diskretinių funkcijų aibę. Koeficientas $\frac{Mc^2 \alpha^2}{2} \approx 13.61 eV$. Normuota radikaloji banginė funkcija turi

šitoki pavidalą:

$$R_{nl}(r) = N_{nl} \left(\frac{2r}{na} \right)^l \exp \left(-\frac{r}{na} \right) L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2r}{na} \right); \quad (6.9)$$

$$n = 1, 2, \dots; \quad l = 0, 1, n-1.$$

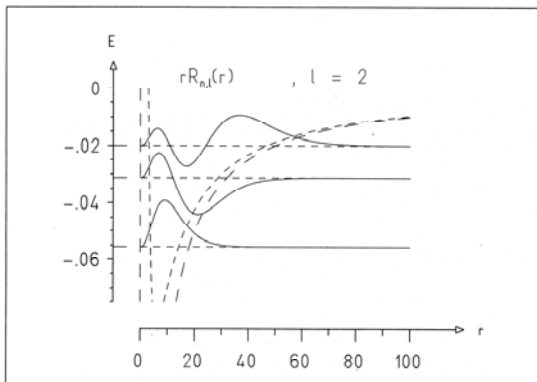
Normavimo daugiklis

$$N_{nl} = \frac{2}{\alpha^{3/2} n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}, \quad (6.10)$$

o parametras

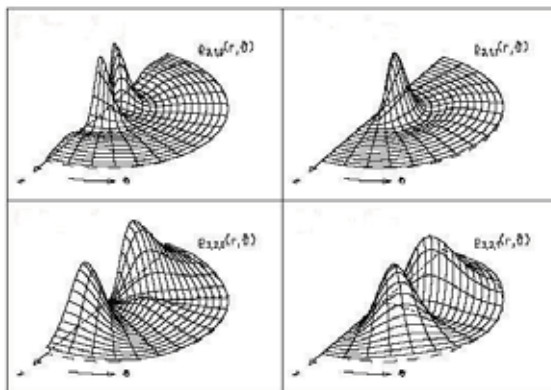
$$a = \frac{\hbar}{\alpha Mc} \approx 0.5292 \cdot 10^{-10} m \quad (6.11)$$

lygus arčiausiai branduolio esančios vidinės Boro orbitos spinduliui. Funkcija $L_{n-l-1}^{2l+1}(x)$ yra Lagero daugianaris. Vandenilio atomo radikaliosios banginės funkcijos pavaizduotos 6.1 pav.



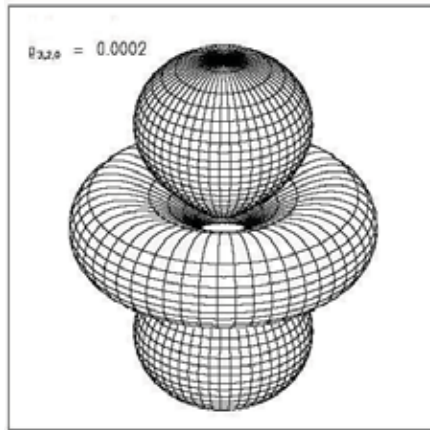
6.1 pav. Vandenilio atomo radikaliosios banginės funkcijos

Grįžkime prie vandenilio atomo elektrono trimačių banginių funkcijų (6.5). Jų absoliutinių verčių kvadratai $\rho_{nlm}(r, \vartheta)$, nepriklausantys nuo azimuto ϕ , yra parodyti 6.2 pav. Jie išreiškia tikimybės rasti elektroną konkrečiame erdvės taške tankius.



6.2 pav. Vandenilio atomo elektrono trimačių banginių funkcijų, nepriklausančių nuo azimuto ϕ , absoliutinių verčių kvadratai $\rho_{nlm}(r, \vartheta)$

Vandenilio atomo banginė funkcija, atitinkanti kvantinius skaičius $n = 3, l = 2, m = 0$, yra pavaizduota 6.3 pav.



6.3 pav. Vandenilio atomo banginė funkcija, atitinkanti kvantinius skaičius $n = 3, l = 2, m = 0$

Prieš pradėdant tirti radikaliasias funkcijas $R_{nl}(r)$, verta panagrinėti Lagero daugianarių savybes. Lagero daugianariai yra antrosios eilės diferencialinės lygties sprendiniai, priklausantys nuo parametrų n ir α :

$$x \frac{d^2 L_n^\alpha(x)}{dx^2} + (\alpha + 1 - x) \frac{dL_n^\alpha(x)}{dx} + nL_n^\alpha(x) = 0. \quad (6.12)$$

Daugianariai yra apskaičiuojami pagal rekurentinę formulę:

$$L_0^\alpha(x) = 1, \quad L_1^\alpha(x) = \alpha + 1 - x, \quad (6.13)$$

$$(n+1)L_{n+1}^\alpha(x) = (2n + \alpha + 1 - x)L_n^\alpha(x) - (n + \alpha)L_{n-1}^\alpha(x).$$

Jie taip pat gali būti išreikšti per gama funkcijas

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{j=0}^n (-1)^j \frac{\Gamma(\alpha + n + 1) x^j}{\Gamma(n - j + 1) \Gamma(\alpha + j + 1) j!} \quad (6.14)$$

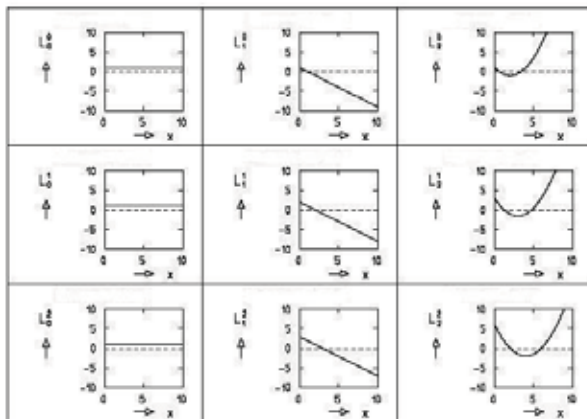
arba apskaičiuoti pagal Rodrigues formulę:

$$L_n^\alpha(x) = \frac{1}{n!} \frac{e^x}{x^\alpha} \frac{d^n}{dx^n} (x^{n+\alpha} e^{-x}). \quad (6.15)$$

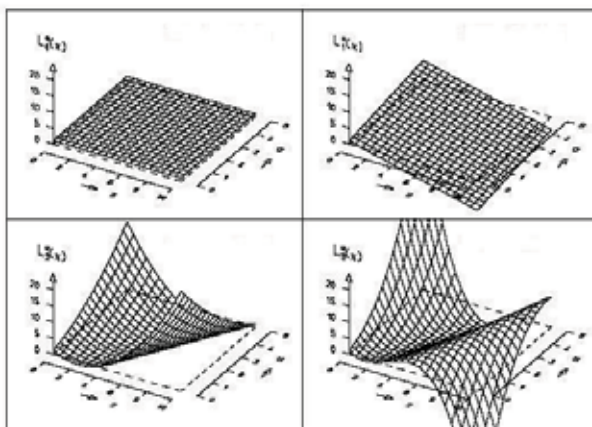
Lagero daugianariai turi tenkinti ortogonalumo sąlygą:

$$\int_0^{\infty} L_n^{\alpha}(x) L_m^{\alpha}(x) x^{\alpha} e^{-x} dx = 0, \quad n \neq m. \quad (6.16)$$

Daugianario nulių skaičius lygus n . Lagero daugianarių priklausomybė nuo koordinatės x yra parodyta 6.4 pav., o 6.5 pav. pavaizduota jų priklausomybė nuo koordinatės ir parametro α .



6.4 pav. Lagero daugianarių priklausomybė nuo koordinatės x



6.5 pav. Lagero daugianarių priklausomybė nuo koordinatės x ir parametro α

Vandenilio atomo elektrono radikalinių funkcijų $R_{nl}(r)$, pateiktą 6.9 formule, pobūdį didelių r verčių srityje nulemia eksponentinė funkcija $e^{-\frac{r}{na}}$, o koordinatų pradžios aplinkoje – daugiklis $\left(\frac{2r}{na}\right)^l$. Radikaliosios banginės funkcijos turi $n - l - 1$ mazgų, kurių skaičius ir padėtis sutampa su Lagero daugianarių nulių skaičiumi ir padėtimis.

Didėjant energijos vertėms, vandenilio atomo banginės funkcijos gana sparčiai išplinta į didelių spindulio reikšmių sritį. Šio reiškinio priežastis yra spartus Kulono potencialo duobės platėjimas didėjant energijai. Energijos verčių spektras yra išsigimęs, kadangi, esant tam tikrai kvantinio skaičiaus n vertei, kvantinis skaičius l gali įgyti bet kurią reikšmę iš $0 \leq l \leq n - 1$ kitimo srities, o kiekvieną turimą l vertę atitinka $2l + 1$ judesio kiekio momento projekcijos vertė, nes $-l \leq m \leq l$. Taigi kiekvieną n atitinka

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2 \quad (6.17)$$

skirtingų būsenų, turinčių tą pačią tikrinę energijos vertę E_n . Vandenilio atomo trimatės banginės funkcijos išreiškiamos kaip radikalinių banginių funkcijų ir sferinių harmonikų sandauga:

$$\varphi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\vartheta, \phi). \quad (6.18)$$

Ji išreiškia tikimybės rasti elektroną konkrečiame erdvės taške tankius.

III. Darbo užduotys

6.1. Nubrėžkite Kulono potencialo, kurio parametras $\alpha = 1$, a) radikalniąją funkciją R_{nl} , b) rR_{nl} , c) R_{nl}^2 , d) $r^2 R_{nl}^2$ intervale $0 \leq r \leq 30$, kai $l = 0, 1$. Apskaičiuokite trijų žemiausių lygmenų energijas. Pradėkite nuo 4 deskriptoriaus.

6.2. Pakartokite 9.1 užduotį, esant tokioms l vertėms: $l = 20, 21, 22, 23$. Pradėkite nuo 4 deskriptoriaus. Paaiškinkite spindulinių funkcijų priklausomybę nuo l .

6.3. Nubrėžkite Kulono potencialo tikimybių tankius $\rho_{nlm}(r, \vartheta)$ duotam kvantinių skaičių rinkiniui $n = 1, l = 0, m = 0$. Pradėkite nuo 9 deskriptoriaus. Kodėl neegzistuoja būsena $n = 1, l = 1, m = 1$?

6.4. Nubrėžkite Kulono potencialo tikimybių tankius $\rho_{nlm}(r, \vartheta)$ duotiems kvantinių skaičių rinkiniams $n = 2, l = 0, m = 0$ ir $n = 2, l = 1, m = 0, 1$. Pradėkite nuo 9 deskriptoriaus. Kaip mazgų skaičius priklauso nuo kvantinių skaičių?

6.5. Nubrėžkite Kulono potencialo tikimybių tankius $\rho_{nlm}(r, \vartheta)$ duotam kvantinių skaičių rinkiniui $n = 15, l = 14, m = 0, 14$. Pradėkite nuo 9 deskriptoriaus. Paaiškinkite skirtumus atvejais, kai $m = 0$ ir $m = 14$.

6.6. Nubrėžkite Lagero daugianarius $L_n^\alpha(x)$, esant atitinkamiems parametrų rinkiniams: a) $n = 3, \alpha = 0, 1; n = 4, \alpha = 0, 1$ x intervale $0 \leq x \leq 11$, b) $n = 3, \alpha = 0, 1; n = 4, \alpha = 0, 1$ x intervale $0 \leq x \leq 13$. Grafikus pateikite 2×2 formatu. Pradėkite nuo 21 deskriptoriaus.

6.7. Nubrėžkite vandenilio atomo radikaliąsias bangines funkcijas intervale $0 \leq x \leq 60$, esant atitinkamiems kvantinių skaičių rinkiniams: $n = 0, 1, 2; l = 0, 1, 2$. Grafikus pateikite 3×3 formatu. Pradėkite nuo 23 deskriptoriaus.

6.8. Nubrėžkite vandenilio atomo radikaliąsias bangines funkcijas intervale $0 \leq x \leq 60$, esant atitinkamiems kvantinių skaičių rinkiniams: $n = 3, 4, 5$ ir a) $l = 0, 1, 2$; b) $l = 0, 1, 2$. Grafikus pateikite 3×3 formatu. Gautus rezultatus palyginkite su 6.7 užduoties rezultatais. Pradėkite nuo 23 deskriptoriaus.

6.9. Nubrėžkite Lagero daugianarius $L_n^\alpha(x)$ intervale $0 \leq x \leq 10$ su kintamu parametru α ($0 \leq \alpha \leq 5$) ir $n = 0, 1, 2, 3$. Grafikus pateikite 2×2 formatu. Pradėkite nuo 24 deskriptoriaus.

6.10. Nubrėžkite Lagero daugianarius $L_n^\alpha(x)$ intervale $0 \leq x \leq 10$ su kintamu parametru α ($0 \leq \alpha \leq 5$) ir $n = 4, 5, 6, 7$. Grafikus pateikite 2x2 formatu. Pradėkite nuo 24 deskriptoriaus.

IV. Rezultatų pateikimas

1. Pateikdami ataskaitą nurodykite: laboratorinio darbo pavadinimą; savo vardą ir pavardę; laboratorinio darbo tikslą.
2. Užrašykite laboratorinio darbo užduoties sąlygą.
3. Nubrėžkite susietųjų harmoninių osciliatorių potencialo duobės tikrines funkcijas, tikimybių tankius, koordinačių vidurkių pločių ir koreliacijos koeficiento priklausomybes nuo laiko.
4. Pateikite laboratorinio darbo išvadas.
5. Pasiruoškite ginti laboratorinį darbą. Tam tikslui pasirenkite atsakyti į kontrolinius klausimus.

V. Kontroliniai klausimai

1. Kokio potencialo lauke juda elektronas vandenilio atome?
2. Vandenilio atomo Šrėdingerio lygtis.
3. Kaip priklauso funkcijų R_{nl} , rR_{nl} , R_{nl}^2 , $r^2 R_{nl}^2$ mazgų skaičius nuo kvantinių skaičių n ir l ?
4. Kaip keičiasi radikaliųjų funkcijų grafikai, augant l vertėms?
5. Kaip tai paaiškintumėte?
6. Kaip priklauso tikimybės tankių $\rho_{nlm}(r, \vartheta)$ mazgų skaičius nuo kvantinių skaičių n , l ir m ?
7. Nuo kokių parametrų priklauso Lagero daugianariai?
8. Kokios diferencialinės lygties sprendiniai yra Lagero daugianariai?
9. Lagero daugianarių rekurentinė formulė. Lagero daugianarių skaičiavimo formulės.
10. Lagero daugianarių ortogonalumo sąlyga.

VI. Literatūra

1. Brandt S., Dahmen H. D. (1993). *Iliustruotoji kvantinė mechanika*. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas. P. 206–213.
2. Brandt S., Dahmen H. D., Stroh T. (2003). *Interactive Quantum Mechanics*. P. 134–135. New York: Springer-Verlag.
3. Deveikis A. (2000). *Kvantinės mechanikos kompiuteriniai laboratoriniai darbai*. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas. P. 61–64.

7 LABORATORINIS DARBAS

Vienmatė potencialinė sklaida

I. Darbo tikslai

- 1) Išnagrinėti potencialinę sklaidą keleto duobių sistemose.
- 2) Išnagrinėti rezonansinę sklaidą.
- 3) Nustatyti sklaidos amplitudę.

II. Teorinė dalis

Dalelės sklaida vadinama glaudžiaja, jeigu sklaidos metu pakinta tikslai judesio kiekis, o dalelės energija išlieka tvari. Jėga, kuriai veikiant vyksta sklaida, vadinama artisieke jėga, jeigu ji praktiškai nelygi nuliui tik baigtinėje srityje apie jėgų centrą. Šios srities būdingasis ilgis d vadinamas jėgos veikimo siekiu. Dalelės glaudžioji sklaida susideda iš trijų etapų:

- I) Dalelė laisvai juda jėgos veikimo srities link.
- II) Dalelė juda jėgos veikimo lauke ir dėl lauko poveikio dalelės judesio kiekis pasikeičia.
- III) Po sklaidos išskriejusi iš jėgos veikimo lauko dalelė vėl juda laisvai.

Dalelės, kurios masė yra m , laisvąjį judėjimą apibūdina de Broilio bangų paketas

$$\psi_p(x - x_0, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px + px_0)\right]. \quad (7.1)$$

Jeigu paketo spektrinė funkcija $f(p)$ įgyja nelygias nuliui vertes teigiamų p verčių srityje, paketas

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(p) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}p(x - x_0)\right) dp \quad (7.2)$$

juda išilgai x ašies iš kairės į dešinę x didėjimo kryptimi. Jei sumuojamos de Broilio bangos, turinčios neigiamus judesio kiekius:

$$\psi_{-p}(x - x_0, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et + px - px_0) \right], \quad (7.3)$$

bet tą pačią spektrinę funkciją $f(p)$, tai pakeitimo $p' = -p$ dėka galime pamatyti, kad turime naują paketą su spektrine funkcija $f(-p)$, kurios nuliui nelygios vertės yra pasiskirsčiusios neigiamų judesio kiekių srityje. Toks paketas juda iš dešinės į kairę, tai yra x verčių mažėjimo kryptimi. Taigi, turimos spektrinės funkcijos paketai, sudaryti iš de Broilio bangų $\psi_p(x - x_0, t)$ ir $\psi_{-p}(x - x_0, t)$, juda priešingomis kryptimis. Judėjimo kryptį apibrėžia stacionariosios bangos eksponentinės funkcijos ženklas $\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp \left(\pm \frac{i}{\hbar} p(x - x_0) \right)$. Jeigu bangų paketo spektrinės funkcijos $f(p)$ nuliui nelygios vertės yra teigiamų judesio kiekių verčių srityje, tai paketas, susidedantis iš stacionariųjų bangų

$$\exp \left(\frac{i}{\hbar} p(x - x_0) \right) = \exp [ik(x - x_0)], \quad (7.4)$$

juda x verčių didėjimo kryptimi, o paketas, sudarytas iš stacionariųjų bangų

$$\exp \left(-\frac{i}{\hbar} p(x - x_0) \right) = \exp [-ik(x - x_0)], \quad (7.5)$$

juda x verčių mažėjimo kryptimi.

Panagrinėkime dalelę, judančią iš kairės į dešinę. Tegul dalelę veikianti jėga

$$F(x) = -\frac{d}{dx} V(x), \quad (7.6)$$

pagal apibrėžimą lygi potencinės energijos išvestinei, turi baigtinį siekį d , o jos veikimo sritis yra taško $x = 0$ aplinkoje. Pradinė pake-

to padėtis, apibrėžiama didele neigiama x_0 verte, atitinka jo lokalizaciją toli kairėje. Tada dalelė juda laisvai, neveikiama jokių jėgų. Šioje srityje sprendinys yra de Broilio bangų paketas $\psi_p(x - x_0, t)$. Po vienmatės sklaidos dalelė gali tik pereiti potencialo barjerą arba atsispindėti. Perėjusi dalelė didelių x verčių srityje vėl juda laisvai, todėl vaizduojama de Broilio bangų $\psi_{p'}(x - x_0, t)$ paketu. Judesio kiekio vertės p ir p' yra skirtingos, jeigu potencialas $V(x)$ teigiamų ir neigiamų x atvejais įgyja skirtingas vertes. Atsispindėjusią dalelę apibūdina judesio kiekis $-p$, todėl ji ilgainiui palieka jėgos veikimo lauką ir grįžta į didelių neigiamų x sritį, kurioje ji vaizduojama de Broilio bangų $\psi_{-p}(x - x_0, t)$ paketu. Gautos ribinės sąlygos reikalauja, kad stacionariosios Šrėdingerio lygties sprendinys asimptotinėse srityse turėtų tokį pavidalą:

$$\varphi_E \rightarrow \begin{cases} \exp\left[\frac{i}{\hbar} p(x - x_0)\right] + B \exp\left[-\frac{i}{\hbar} p(x - x_0)\right], & x \ll 0; \\ A \exp\left[\frac{i}{\hbar} p'(x - x_0)\right], & x \gg 0. \end{cases} \quad (7.7)$$

Panagrinėkime potencialo šuolį, kurio aukštis taške $x = 0$ lygus V_0 . Jis dalija erdvę į dvi sritis. Pirmoje, atitinkančioje neigiamas vertes, potencialas lygus nuliui, o antroje jis pastovus $V(x) = V_0$. Stacionarioji Šrėdingerio lygtis abiejose srityse yra to paties pavidalo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \varphi_E(x) + V_i(x) \varphi_E(x) = E \varphi_E(x), \quad (7.8)$$

tačiau $V_1 = 0$, o $V_2 = V_0$. Stacionarusis sprendinys, atitinkantis energijos vertę E , yra lygus:

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= \exp\left[\frac{i}{\hbar} p(x - x_0)\right] + B_1 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} p(x - x_0)\right], & x < 0; \\ \varphi_1(x) &= A_2 \exp\left[\frac{i}{\hbar} p'(x - x_0)\right], & x > 0.\end{aligned}\quad (7.9)$$

Pirmojoje srityje judesio kiekis $p = \sqrt{2mE}$, o antrojoje – $p' = \sqrt{2m(E - V_0)}$. Kadangi potencialas turi trūkį taške $x = 0$, tai funkcijos $\varphi(x)$ antroji išvestinė šiame taške taip pat nėra tolydi, tačiau pati funkcija ir jos pirmoji išvestinė turi būti tolydžios visur. Šios sąlygos leidžia rasti koeficientus B_1 ir A_2 . Krintančios bangos išraiškos koeficientas B_1 gali būti bet koks. Kad būtų paprasčiau, jis prilyginamas vienetui. Panagrinėkime stūmos šuolį ($V_0 > 0$) ir krintančiąją bangą, kurios energija $E < V_0$. Klasikinė dalelė tuo atveju tik atsispindėtų nuo potencialo šuolio. Kvantiniu atveju vaizdas yra gerokai sudėtingesnis. Perėjusios bangos judesio kiekis antroje srityje yra menamas

$$p' = \sqrt{2m(E - V_0)} = i\sqrt{2m(V_0 - E)}, \quad (7.10)$$

todėl banga

$$\begin{aligned}\varphi_2(x) &= A_2 \exp\left[\frac{i}{\hbar} p'(x - x_0)\right] = \\ &= A_2 \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}(x - x_0)\right]\end{aligned}\quad (7.11)$$

yra reali eksponentinė funkcija, sparčiai artėjanti prie nulio antroje srityje. Pilnoji, priklausanti nuo laiko banginė funkcija gaunama padauginus stacionariąją bangą iš daugiklio $e^{-\frac{iEt}{\hbar}}$.

Kai $E > V_0$, krintančiosios bangos judesio kiekis

$$p' = \sqrt{2m(E - V_0)} \quad (7.12)$$

yra realus ir antrojoje srityje, todėl abiejose srityse bangos kitimo pobūdis visai panašus.

Panagrinėsime potencialo barjerą, kai tarp taškų $x = 0$ ir $x = d$ potencialas $V(x) = V_0$, o visur kitur jis lygus nuliui. Tuo atveju yra trys skirtingos sritys, kuriose sprendiniai lygūs:

$$\begin{aligned}\varphi_1(x) &= \exp\left[\frac{i}{\hbar} p(x - x_0)\right] + B_1 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} p(x - x_0)\right], & x < 0; \\ \varphi_2(x) &= A_2 \exp\left[\frac{i}{\hbar} p'(x - x_0)\right] + B_2 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} p'(x - x_0)\right], & 0 < x < d; \\ \varphi_3(x) &= A_3 \exp\left[\frac{i}{\hbar} p(x - x_0)\right], & x > d.\end{aligned}\quad (7.13)$$

Judesio kiekis antroje srityje $p' = \sqrt{2m(E - V_0)}$, todėl jis realus, kai $E > V_0$, ir menamas, kai $E < V_0$. Kompleksinius koeficientus A ir B galima rasti iš banginės funkcijos ir jos išvestinės tolydumo sąlygų barjero kraštuose.

Tarkime, kad turime N potencialų barjerą. Panagrinėkime bangos perėjimo ir atsispindėjimo per tokį potencialų barjerą tikimybes. Šiuo atveju pakanka žinoti stacionariųjų bangų amplitudes asimptotinėse srityse, tai yra toli nuo barjerų sistemos kairėje ir dešinėje. Bendru atveju jas vadinsime I ir N sritimis. Stacionariosios bangos šiose srityse:

$$\begin{aligned}\varphi_I &= \exp\left[\frac{i}{\hbar} p(x - x_0)\right] + B_1 \exp\left[-\frac{i}{\hbar} p(x - x_0)\right], \\ \varphi_N &= A_N \exp\left[\frac{i}{\hbar} p(x - x_0)\right].\end{aligned}\quad (7.14)$$

Perėjimo tikimybė yra lygi $|A_N|^2$, o atsispindėjimo tikimybė – $|B_1|^2$.

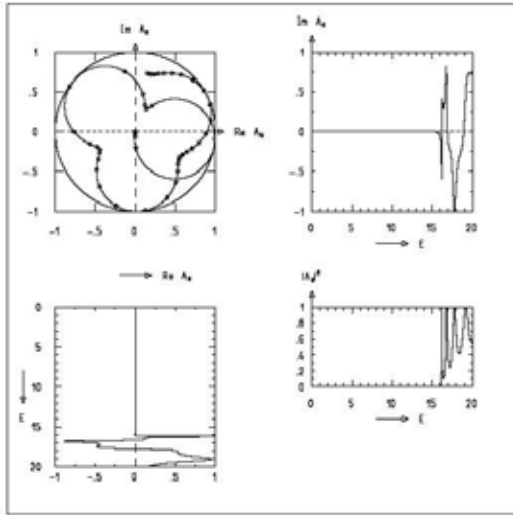
Faktas, kad dalelė gali tik atsispindėti arba pereiti, užrašomas sąlyga

$$|A_N|^2 + |B_1|^2 = 1, \quad (7.15)$$

kuri vadinama amplitudžių A_N ir B_1 unitariškumo sąlyga. Ji išreiškia pilnosios tikimybės tvermę. Jei atsispindėjusios bangos nelieta, tuomet $B_1 = 0$, ir unitariškumo sąlyga leidžia A_N įgyti vertes kompleksinės plokštumos skritulyje, kurio spindulys lygus vienetui. Šio dydžio priklausomybė nuo energijos parodyta 7.1 pav., kurio viršuje yra Argando diagrama. Tai kreivė, rodanti kompleksinio dydžio A_N priklausomybę nuo energijos. Apskritimas žymi aibę taškų, kuriuose $|A_N|^2 = 1$. Naudinga ištirti menamosios dalies $\text{Im } A_N$ ir realiosios dalies $\text{Re } A_N$ kitimą, energijai įgyjant vertes intervale nuo nulio iki dvigubo barjero aukščio. Menamoji dalis beveik visų energijų, mažesnių už barjero aukštį, atveju kinta nulio aplinkoje, lėtai toldama nuo jos, kai energija didėja. Kai $|A_N|^2 = 1$, atsiranda rezonanso reiškinys. Rezonanso energijos aplinkoje menamoji dalis sparčiai padidėja, po to dar sparčiau patenka į neigiamų reikšmių sritį ir tuoj pat grįžta į nulio aplinką. Realioji dalis (jos kitimas parodytas paveiksle su skrituliu), kai energijos reikšmės yra mažesnės už barjero aukštį, taip pat kinta nulio aplinkoje. Energijai didėjant, ji sumažėja iki neigiamų verčių. Rezonansinės energijos aplinkoje ji įgyja neigiamas smailes, kurios tolydžio platinėja didėjant sužadavimo energijai. A_N modulio kvadrato kitimo kreivė taip pat turi platinėjančias smailes rezonansų srityse. Kai kurioms energijos vėrtėms, tarp jų ir didesnėms už barjero aukštį, $|A_N|^2$ tampa lygus vienetui. Tai reiškia, kad per barjerų sistemą pereinama be atspindžio.

Iš Argando diagramų galime atpažinti tipiškus rezonanso požymius. Ne rezonanso srityje A_N kinta labai lėtai, kol energija yra mažesnė už barjero aukštį, ji kinta nulio aplinkoje. Rezonanso srityje kitimas labai spartus, taškas juda apskritimu prieš laikrodžio rodyklę, o realioji ir menamoji dalys įgyja būdingas rezonanso smailes. Kai energija pasidaro didesnė už barjero aukštį, trajektorijų kreivės nebe-

grįžta į kompleksinės plokštumos nulinę aplinką, o pernešimas yra didelis ir ne rezonanso srityse.



7.1 pav. Argando diagrama, rodanti dalies, prasiskverbusios per dviejų barjerų sistemą, kompleksinės amplitudės A_N priklausomybę nuo energijos. Energija kinta nuo nulio iki vertės, lygios dvigubam barjero aukščiui. Amplitudės priklausomybė nuo energijos aiški iš kreivės kompleksinėje plokštumoje, prasidedančios koordinatinių pradžių taške. Apskritimas riboja visą leistiną A_N kitimo sritį. Realiosios dalies priklausomybė nuo energijos pavaizduota apatinėje, o menamosios – viršutinėje paveikslėlio dalyje.

Vietoje kompleksinių amplitudžių A_N ir B_1 naudojamos ir kitokiu parametru rinkiniu, apibrėžiamu sąlygomis:

$$\begin{aligned} A_N &= 1 + 2iT_T, \\ B_1 &= 2iT_R. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Pernešimo matricos elementai T_T ir T_R apibrėžia parametrų A_N ir B_1 nuokrypius nuo verčių, kurias jie įgytų tuo atveju, jei potencialo

nebūtų, tai yra nuo verčių $A_N = 1$, $B_1 = 0$. Įrašę šias išraiškas į sklaidos amplitudžių unitariškumo sąlygą (7.15), gauname T matricos unitariškumo sąlygą:

$$\operatorname{Im} T_T = T_T T_T^* + T_R T_R^*. \quad (7.17)$$

Lygtį galima parašyti ir šitaip:

$$(\operatorname{Re} T_T)^2 + \left(\operatorname{Im} T_T - \frac{1}{2} \right)^2 = \frac{1}{4} - T_R T_R^*. \quad (7.18)$$

Jei $T_R T_R^* = 0$, šis sąryšis apibrėžia kompleksinius skaičius T_T , kuriuos vaizduoja apskritimo (jo spindulys lygus $\frac{1}{2}$, o centras taške $\frac{i}{2}$) taškai. Kadangi $|B_1|^2 \leq 1$, tai $|T_R|^2 \leq \frac{1}{4}$, todėl lygties dešinioji pusė visada neneigiama. Kai T_R vertės nelygios nuliui, kompleksiniai skaičiai T_T atsiduria srityje, kurią riboja apskritimas.

III. Darbo užduotys

7.1. Nubrėžkite išsklaidytosios bangos banginės funkcijos a) realiąją dalį, b) menamąją dalį, c) modulio kvadratą. Sklaidos potencialas lygus

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ 2, & 0 \leq x < 0.5; \\ 0, & x \geq 0.5. \end{cases}$$

Pradėkite nuo 20 deskriptoriaus. Kodėl potencialo srityje banginė funkcija yra tiesė?

7.2. Nubrėžkite išsklaidytosios bangos banginės funkcijos a) realiąją dalį, b) menamąją dalį, c) modulio kvadratą. Sklaidos potencialas lygus

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ 2, & 0 \leq x < 0.5; \\ 0, & 0.5 \leq x < 1.5; \\ 2, & 1.5 \leq x < 2; \\ 0, & x \geq 2. \end{cases}$$

Pradėkite nuo 20 deskriptoriaus. Kodėl kairėje pusėje esančios bangos amplitudė yra mažesnė už potencialo barjero aukštį? Ar gali tokia banga prasiskverbti pro potencialų barjerą?

7.3. Ištirinėkite rezonansinę sklaidą dviejų potencialo duobių sistemoje:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ 2.5, & 0 \leq x < 0.5; \\ 0, & 0.5 \leq x < 2.5; \\ 2.5, & 2.5 \leq x < 3; \\ 0, & x \geq 3. \end{cases}$$

a) Nubrėžkite banginės funkcijos modulio kvadratus, esant energijos vertėms $0.4 \leq E \leq 2.4$. Kokioms energijos vertėms esant stebimas rezonansas? b) Nubrėžkite banginės funkcijos realiąją ir menamąją dalis toms energijos vertėms, kurios tenkina rezonanso sąlygą. Pradėkite nuo 20 deskriptoriaus.

7.4. Ištirinėkite rezonansinę sklaidą nesimetrinėje trijų potencialo duobių sistemoje:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ 7, & 0 \leq x < 0.5; \\ 0, & 0.5 \leq x < 2.5; \\ 7, & 2.5 \leq x < 3; \\ 0, & 3 \leq x < 4.5; \\ 7, & 4.5 \leq x < 5; \\ 0, & x \geq 5. \end{cases}$$

Nubrėžkite banginės funkcijos modulio kvadratus, esant energijos vertėms a) $0.01 \leq E \leq 1.01$, b) $1.01 \leq E \leq 2.01$, c) $2.01 \leq E \leq 3.01$, d) $3.01 \leq E \leq 4.01$, e) $4.01 \leq E \leq 5.01$, f) $5.01 \leq E \leq 6.01$, g) $6.01 \leq E \leq 7.01$. Suraskite rezonansines energijos vertes kiekviename iš šių intervalų. Pradėkite nuo 21 deskriptoriaus.

7.5. Nubrėžkite potencialinio barjero perėjimo tikimybę $|A_N|^2$ duotai dviejų potencialo duobių sistemai:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ 7, & 0 \leq x < 2.5; \\ 0, & 2.5 \leq x < 3; \\ 7, & 3 \leq x < 4.5; \\ 0, & x \geq 5. \end{cases}$$

Apskaičiuokite energijas, esant maksimaliai $|A_N|^2$, ir palyginkite jas su rezonansinėmis energijos vertėmis. Pradėkite nuo 27 deskriptoriaus.

7.6. Panagrinėkite potencialinį barjerą

$$V(x) = \begin{cases} V_1, & x < 0; \\ V_2, & 0 \leq x < 0.5; \\ V_3, & 0.5 \leq x < 1; \\ V_4, & 1 \leq x < 1.5; \\ V_5, & x \geq 1.5. \end{cases}$$

Kai potencialų vertės lygios $V_1 = 0$, $V_2 = 7$, $V_3 = -0.5$, $V_4 = 6.5$, $V_5 = -1$, atsiranda rezonanso reiškiny, ir energija tuomet lygi $E = 3.67$. Nubrėžkite banginės funkcijos modulio kvadratą, esant a) „nulinei įtampai“ $V_1 = 0$, $V_2 = 7$, $V_3 = 0$, $V_4 = 7$, $V_5 = 0$, b) įtampai, mažesnei už rezonansinę $V_1 = 0$, $V_2 = 7$, $V_3 = -0.25$, $V_4 = 6.75$, $V_5 = -0.5$, c) rezonansinei įtampai $V_1 = 0$, $V_2 = 7$, $V_3 = -0.5$, $V_4 = 6.5$, $V_5 = -1$, d) įtampai, didesnei už rezonansinę $V_1 = 0$, $V_2 = 7$, $V_3 = -0.75$,

$V_4 = 6.25$, $V_5 = -1.5$. Pradėkite nuo 20 deskriptoriaus. Kvantinės duobės įtampa skaičiuojama kaip pradinio ir galutinio potencialo reikšmių skirtumas $U = V_1 - V_5$. Srovės, tekančios per potencialų barjerą, stipris yra proporcingas potencialinio barjero perėjimo tikimybei $|A_5|^2$: $I = \alpha |A_5|^2$. Apskaičiuokite potencialinio barjero varžą kiekvienu iš duotų atvejų.

7.7. Panagrinėkite potencialinį barjerą

$$V(x) = \begin{cases} V_1, & x < 0; \\ V_2, & 0 \leq x < 0.5; \\ V_3, & 0.5 \leq x < 1; \\ V_4, & 1 \leq x < 1.5; \\ V_5, & 1.5 \leq x < 2; \\ V_6, & 2 \leq x < 2.5; \\ V_7, & x \geq 2.5. \end{cases}$$

Potencialų vertės $V_1 = 0$, $V_2 = 10$, $V_4 = 9.5$, $V_6 = 9$, $V_7 = -1$, yra fiksuotos. Potencialų V_3 ir V_5 vertės kinta: a) įtampai esant mažesnei už rezonansinę $V_3 = V_5 = -0.35$, b) esant rezonansinei įtampai $V_3 = V_5 = -0.5$, c) įtampai esant truputį didesnei už rezonansinę $V_3 = V_5 = -0.65$, d) įtampai, didesnei už rezonansinę $V_3 = V_5 = -0.75$. Nubrėžkite banginės funkcijos modulio kvadratus visais keturiais atvejais ir pateikite juos viename lange. Pradėkite nuo 20 deskriptoriaus.

7.8. Nubrėžkite potencialinio barjero perėjimo tikimybę $|A_N|^2$ duotam potencialui

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ 16, & 0 \leq x < 4; \\ 0, & x \geq 4 \end{cases}$$

esant energijų intervalui $15 \leq E \leq 22$. Apskaičiuokite visų galimų rezonansų energijas. Pradėkite nuo 31 deskriptoriaus.

7.9. Argando diagramoje pavaizduokite a) barjero perėjimo tikimybę $|A_N|^2$, b) kompleksinės amplitudės A_N realiąją dalį $\text{Re}A_N$ ir c) jos menamą dalį $\text{Im}A_N$ energijų intervale $0 \leq E \leq 40$, esant duotam potencialui

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ -16, & 0 \leq x < 4; \\ 0, & x \geq 4. \end{cases}$$

Pradėkite nuo 31 deskriptoriaus.

7.10. Argando diagramoje pavaizduokite a) pernešimo matricos elemento modulio kvadratą $|T_T|^2$, b) jo realiąją dalį $\text{Re}T_T$ ir c) jo menamą dalį $\text{Im}T_T$ energijų intervale $0 \leq E \leq 1$, esant duotam potencialui

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ -5, & 0 \leq x < 1; \\ 0, & x \geq 1. \end{cases}$$

Pradėkite nuo 36 deskriptoriaus.

IV. Rezultatų pateikimas

1. Pateikdami ataskaitą nurodykite: laboratorinio darbo pavadinimą; savo vardą ir pavardę; laboratorinio darbo tikslą.
2. Užrašykite laboratorinio darbo užduoties sąlygą.
3. Nubrėžkite banginės funkcijos realiąją, menamąją dalis, modulio kvadratus, potencialinio barjero perėjimo tikimybę, Argando diagramas.
4. Pateikite laboratorinio darbo išvadas.

5. Pasiruoškite ginti laboratorinį darbą. Tam tikslui pasirenkite atsakyti į kontrolinius klausimus.

V. Kontroliniai klausimai

1. Kokia sklaida vadinama glaudžiaja?
2. Kaip juda dalelė, veikiama potencialinio barjero?
3. Kaip pakinta dalelės judesio kiekis, jai praėjus potencialinį barjerą?
4. Ar įmanoma, kad dalelė, kurios energija mažesnė už potencialinio barjero aukštį, prasiskverbtų pro barjerą?
5. Kaip gaunama nuo laiko priklausanti banginė funkcija?
6. Kokie koeficientai apibūdina dalelės perėjimą per potencialinį barjerą ir atspindėjimą nuo jo?
7. Kokia yra rezonanso sąlyga?
8. Kokia yra amplitudžių unitariškumo sąlyga?
9. Ką vaizduoja Argando diagrama?
10. Ką apibrėžia pernešimo matricos elementai?

VI. Literatūra

1. Brandt S., Dahmen H. D. (1993). *Iliustruotoji kvantinė mechanika*. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas. P. 51–64, 78–81.
2. Brandt S., Dahmen H. D., Stroh T. (2003). *Interactive Quantum Mechanics*. New York: Springer-Verlag. P. 45–78.
3. Thaller B. (2005). *Advanced Visual Quantum Mechanics*. Springer. P. 80–85.

8 LABORATORINIS DARBAS

Trimatė potencialinė sklaida

I. Darbo tikslai

- 1) Išnagrinėti potencialinę sklaidą sferinio stūmos potencialo lauke.
- 2) Išnagrinėti sferines Beselio ir Noimano funkcijas.
- 3) Ištirti išsklaidytosios bangos radikaliųjų funkcijų priklausomybę nuo energijos.

II. Teorinė dalis

Panagrinėkime stacionariąją Šrėdingerio lygtį trimačiu atveju:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \varphi_E(\vec{r}) = E \varphi_E(\vec{r}), \quad (8.1)$$

čia M – dalelės, judančios potencialo $V(\vec{r})$ lauke, masė, E – jos energija ir $\vec{r}$ – dalelės spindulys – vektorius. Nagrinėkime tiksliai sferiškai simetrinę potencialo duobę. Tokioje duobėje potencialas priklauso tiksliai nuo spindulio $\vec{r}$. Tuomet banginėje funkcijoje iš (8.1) lygties taip pat atsiskiria kintamieji:

$$\varphi_{Elm}(\vec{r}) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \phi). \quad (8.2)$$

Gauname radikalsiosios banginės funkcijos dalies Šrėdingerio lygtį:

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2M}{\hbar^2} \right] R_l(k, r) = E R_l(k, r). \quad (8.3)$$

Be kinetinės ir potencinės energijos operatorių kairiojoje (8.3) lygties pusėje yra narys, išreiškiantis išcentrinį potencialą:

$$\frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2}, \quad (8.4)$$

priklausantį nuo judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus l . Sferinio stūmos potencialo išraiška tuomet būtų tokia:

$$V(r) = \begin{cases} V_0 + \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2}, & 0 \leq r \leq d; \\ \frac{\hbar^2}{2M} \frac{l(l+1)}{r^2}, & d > r; \end{cases} \quad (8.5)$$

kur d yra stūmos potencialo siekis, o V_0 – potencialo barjero aukštis. Kai dalelės judesio kiekis yra tiksliai apibrėžtas, trimatė harmoninė plokščioji banga $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ yra krintančiojo paketo idealizacija. Norint nusakyti trimatės harmoninės plokščiosios bangos $e^{i\vec{k}\vec{r}}$ sklaidą potencialo lauke, reikia suformuluoti ribines sąlygas: toli nuo potencialo veikimo srities radikaloji banginė funkcija turi būti lygi krintančiosios plokščiosios bangos ir išsklaidytos bangos superpozicijai, o kai $r = 0$, radikaloji banginė funkcija turi būti lygi nuliui. Jei dalelė juda laisvai, Šrėdingerio lygties sprendiniai yra sferinės Beselio $j_l(kr)$ ir Noimano $n_l(kr)$ funkcijų kombinacija.

Panagrinėkime plačiau šitas funkcijas. Diferencialinės lygties

$$\left[r^2 \frac{d^2}{dr^2} + 2r \frac{d}{dr} + (r^2 - l(l+1)) \right] f_l(r) = 0, \quad (8.6)$$

priklausančios nuo parametro l , sprendiniai yra pirmojo tipo Beselio funkcijos

$$j_l(r) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{l+1/2}(r), \quad (8.7)$$

antrojo tipo sferinės Beselio funkcijos (taip pat vadinamos sferinėmis Noimano funkcijomis)

$$n_l(r) = -\sqrt{\frac{\pi}{2r}} N_{l+1/2}(r) = (-1)^l j_{-l-1}(r) \quad (8.8)$$

bei pirmojo (+) ir antrojo (-) tipo sferinės Hankelio funkcijos, kurios yra (8.7) ir (8.8) funkcijų tiesinės kombinacijos:

$$\begin{aligned}
h_l^{(+)}(r) &= i[j_l(r) - in_l(r)] = i\sqrt{\frac{\pi}{2r}} H_{l+1/2}^{(1)}(r), \\
h_l^{(-)}(r) &= -i[j_l(r) + in_l(r)] = -i\sqrt{\frac{\pi}{2r}} H_{l+1/2}^{(2)}(r).
\end{aligned} \tag{8.9}$$

Sferinės Hankelio funkcijos gali būti perrašytos tokiu pavidalu:

$$h_l^{(\pm)}(r) = C_l^{\pm} \frac{e^{\pm ir}}{r}, \tag{8.10}$$

čia kompleksiniai koeficientai $C_l^{\pm}$ yra polinomai:

$$C_l^{\pm} = (\mp i)^l \sum_{s=0}^l \frac{1}{2^s s!} \frac{(l+s)!}{(l-s)!} (\mp ir)^{-s}. \tag{8.11}$$

Taigi, pirmosios dvi Hankelio funkcijos yra:

$$h_0^{(\pm)}(r) = \frac{e^{\pm ir}}{r}, \quad h_1^{(\pm)}(r) = \left(\mp i + \frac{1}{r} \right) \frac{e^{\pm ir}}{r}. \tag{8.12}$$

Pritaikius (8.9) sąryšius, galima apskaičiuoti pirmąsias sferinių Beselio ir Noimano funkcijų poras:

$$j_0(r) = \frac{\sin r}{r}, \quad j_1(r) = \frac{\sin r}{r^2} - \frac{\cos r}{r}, \tag{8.13}$$

$$n_0(r) = \frac{\cos r}{r}, \quad n_1(r) = \frac{\cos r}{r^2} - \frac{\sin r}{r}. \tag{8.14}$$

Sferinių Beselio ir Noimano funkcijų pobūdį, kai argumento vertės mažos, nusako šitokios išraiškos:

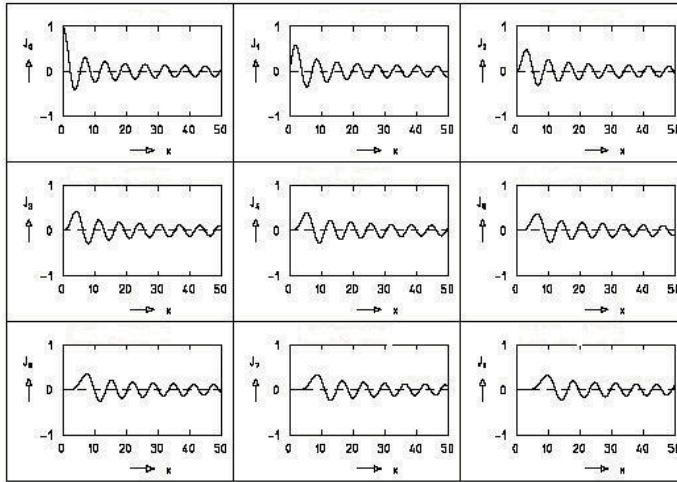
$$j_l(r) \rightarrow \frac{r^l}{(2l+1)!}, \quad n_l(r) \rightarrow (2l-1)!! r^{-(l+1)}, \quad r \rightarrow 0. \tag{8.15}$$

Kai x vertės didelės:

$$j_l(r) \rightarrow \frac{1}{r} \sin\left(r - \frac{1}{2}l\pi\right), \quad n_l(r) \rightarrow \frac{1}{r} \cos\left(r - \frac{1}{2}l\pi\right), \quad r \rightarrow \infty. \tag{8.16}$$

Kadangi sferinės Noimano funkcijos diverguoja koordinačių pradžioje, tik sferinės Beselio funkcijos yra turintys prasmę laisvojo judėjimo radikaliosios Šrėdingerio lygties sprendiniai. Tačiau sferinėmis Noimano ir Hankelio funkcijomis naudojamosi sudarant Šrėdingerio

lygties sprendinių asimptotines išraiškas. Sferinių Beselio funkcijų pavyzdžiai pateikti 8.1 pav.



8.1 pav. Sferinių Beselio funkcijų pavyzdžiai

Nagrinėjant sferinių potencialo duobių bangines funkcijas susiduriama su neigiamomis energijos E vertėmis. Tokiais atvejais

bangos skaičius $k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar}$ būna menamas dydis. Dėl to sferinių

Beselio, Noimano ir Hankelio funkcijų argumentai gali būti ir menami, tai yra $r = i\eta$. Naudodamiesi (8.10) ir (8.11) gauname:

$$h_l^{(\pm)}(i\eta) = (\mp i)^{l \pm 1} \sum_{s=0}^l \frac{1}{2^s s!} \frac{(l+s)!}{(l-s)!} (\pm \eta)^{-s} \frac{e^{\mp \eta}}{\eta}. \quad (8.17)$$

Funkcijomis $h_l^{(+)}(i\eta)$ naudojamosi nusakant susietųjų būsenų bangines funkcijas ne potencialo duobėje. Jų asimptotinį pobūdį, kai argumento vertės yra didelės, vaizduoja šitoks reiškinys:

$$i^{l+1} h_l^{(+)}(i\eta) \rightarrow \frac{e^{-\eta}}{\eta}, \quad n \rightarrow \infty. \quad (8.18)$$

Sugrįžkime prie (8.3) lygties. Kaip jau buvo minėta, radikalioji banginė funkcija $R_l(k, l)$ spindulio r verčių, daug didesnių už jėgos veikimo siekį d , srityje reiškia sferinių Beselio $j_l(kr)$ ir Noimano $n_l(kr)$ funkcijų tiesinę kombinaciją:

$$R_l(k, l) \rightarrow A_l j_l(kr) + B_l n_l(kr), \quad r \gg d. \quad (8.19)$$

Kai kurių potencialų atveju galima rasti tikslūs radikaliosios Šrėdingerio lygties sprendinius. Vienas iš tokių potencialų – potencialas susidedantis iš duobės ir barjero:

$$V(r) = \begin{cases} V_1, & 0 < r < d_1, \\ V_2, & d_1 < r < d_2, \\ V_3 = 0, & d_2 < r < \infty. \end{cases} \quad (8.20)$$

Kadangi trečiojoje srityje potencialas lygus nuliui, tai pagal apibrėžimą jo siekis d lygus d_2 .

Radikaliosios Šrėdingerio lygties sprendinius, apibūdinančius sklaidos procesą, atitinka teigiamos energijos vertės. Vidinėje (pirmojoje) srityje sprendinys proporcingas $j_l(k_1, r)$, kadangi $n_l(k_1, r)$ yra singuliari taške $r = 0$. Kitose srityse (antrojoje ir trečiojoje) apribojimų nėra, todėl sprendinys reiškiamas sferinių Beselio ir Noimano funkcijų superpozicija:

$$R_l(k, r) = \begin{cases} R_{l1}(k_1, r) = A_{l1} j_l(k_1, r), \\ R_{l2}(k_2, r) = A_{l2} j_l(k_2, r) + B_{l2} n_l(k_2, r), \\ R_{l3}(k_3, r) = A_{l3} j_l(k_3, r) + B_{l3} n_l(k_3, r). \end{cases} \quad (8.21)$$

Bangos skaičiai pirmojoje ir antrojoje srityse yra:

$$k_{1,2} = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2M(E - V_{1,2})}, \quad (8.22)$$

o trečiojoje srityje bangos skaičius lygus krintančių dalelių bangos skaičiui:

$$k_3 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2ME}. \quad (8.23)$$

Banginės funkcijos ir jos išvestinės tolydumo visoje argumento srityje sąlygos kiekvienai l vertei leidžia užrašyti keturis sąryšius pastovių potencialo verčių sričių ribose:

$$\begin{aligned} R_{l1}(k, d_1) = R_{l2}(k, d_2), \quad \frac{dR_{l1}(k, d_1)}{dr} &= \frac{dR_{l2}(k, d_2)}{dr}, \\ R_{l2}(k, d_2) = R_{l3}(k, d_3), \quad \frac{dR_{l2}(k, d_2)}{dr} &= \frac{dR_{l3}(k, d_3)}{dr}. \end{aligned} \quad (8.24)$$

Tie sąryšiai leidžia keturis nežinomus koeficientus išreikšti penktuoju. Kadangi vieną iš jų (pavyzdžiui, A_{l3}) galima prilyginti vienetui, nes tai reiškia krintančiosios bangos normavimą, o visi kiti koeficientai yra realūs, iš tos lygčių sistemos galime rasti banginę funkciją visoje argumento kitimo srityje. Tuo atveju ji taip pat yra reali.

Sprendiniai, atitinkantys susietąsias būsenas, egzistuoja tik tam tikroms neigiamoms energijos vėrtėms. Panagrinėkime paprasčiausią sferinės potencialo duobės atvejį:

$$V(r) = \begin{cases} V_1 < 0, & 0 \leq r \leq d, \\ V_2 = 0, & d < r < \infty. \end{cases} \quad (8.25)$$

Bangos skaičius

$$k_1 = \frac{\sqrt{2M(E - V_1)}}{\hbar} \quad (8.26)$$

yra realus pirmojoje srityje, kai $E > V_1$, ir menamas antrojoje srityje:

$$k_2 = i\kappa, \quad \kappa = \frac{\sqrt{-2ME}}{\hbar}. \quad (8.27)$$

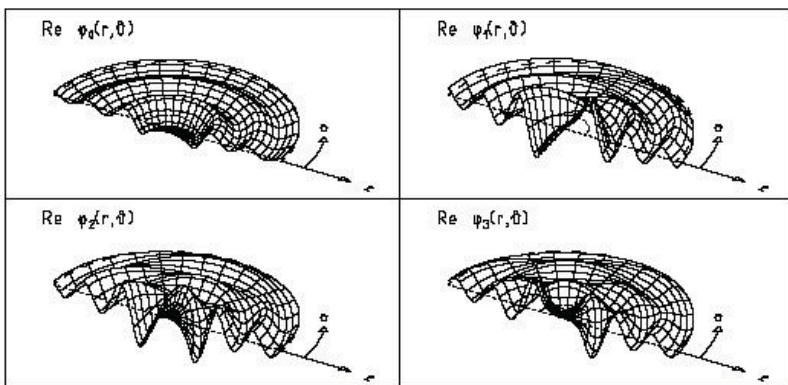
Banginė funkcija turi būti proporcinga sferinei Beselio funkcijai $j_l(k_1 r)$ pirmojoje srityje ir sferinei Hankelio funkcijai $h_l^{(+)}(i\kappa r)$ antrojoje srityje, nes sferinė Beselio funkcija artėja prie nulio, kai r didėja. Tuomet banginės funkcijos bus lygios:

$$R_l(k, r) = \begin{cases} R_{l1}(k, r) = A_{l1} j_l(k_1 r), \\ R_{l2}(k, r) = A_{l2} h_l^{(+)}(i\kappa r). \end{cases} \quad (8.28)$$

Koeficientą A_{l2} galime išreikšti koeficientu A_{l1} , kuris nustatomas iš funkcijos normavimo sąlygos:

$$\int_0^{\infty} |R_l(k, r)|^2 r^2 dr = 1. \quad (8.29)$$

Koeficientų sąryšiui rasti užtenka funkcijos arba jos išvestinės tolydumo sąlygų jungimo taške $r = d$. Kadangi tos sąlygos yra dvi, antroji iš jų nebeleidžia sujungti sprendinių ir jų išvestinių, kai energijos vertės yra bet kokios. Taip atsiranda diskretusis spektras. Kadangi banginė funkcija eksponentiškai mažėja antrojoje srityje, dalelė daugiausiai juda duobėje. Tai būdingas susietųjų būsenų požymis. Išsklaidytųjų plokščiųjų bangų pavyzdžiai pateikti 8.2 pav.



8.2. Plokščiosios bangos, krintančios iš kairės, sklaida stūmos potencialo lauke

III. Darbo užduotys

8.1. Nubrėžkite sferines Beselio funkcijas $j_l(r)$ intervale $0 \leq r \leq 50$, esant tokioms l vertėms: a) $l = 9, 10, 11, 12$, b) $l = 13, 14, 15, 16$. Grafikus pateikite 2×2 formatu. Pradėkite nuo 12 deskriptoriaus.

8.2. Nubrėžkite sferines Noimano funkcijas $n_l(r)$ intervale $0 \leq r \leq 50$, esant tokioms l vertėms: a) $l = 9, 10, 11, 12$, b) $l = 13, 14, 15, 16$. Grafikus pateikite 2×2 formatu. Pradėkite nuo 13 deskriptoriaus.

8.3. Nubrėžkite sferines Hankelio funkcijas su menamu argumentu $i^{l+1}h_l(i\eta)$ intervale $0 \leq x \leq 20$, esant tokioms l vertėms: a) $l = 1, 2, 3, 4$, b) $l = 5, 6, 7, 8$. Grafikus pateikite 2×2 formatu. Pradėkite nuo 14 deskriptoriaus.

8.4. Nubrėžkite sferines Beselio funkcijas su menamu argumentu $i^{l+1}j_l(i\eta)$ intervale $0 \leq x \leq 20$, esant tokioms l vertėms: a) $l = 21, 22, 23, 24$, b) $l = 25, 26, 27, 28$. Grafikus pateikite 2×2 formatu. Pradėkite nuo 15 deskriptoriaus.

8.5. Nubrėžkite sferines Noimano funkcijas su menamu argumentu $i^{l+1}n_l(i\eta)$ intervale $0 \leq x \leq 20$, esant tokioms l vertėms: a) $l = 31, 32, 33, 34$, b) $l = 35, 36, 37, 38$. Grafikus pateikite 2×2 formatu. Pradėkite nuo 16 deskriptoriaus.

8.6. Nubrėžkite radikaliąsias bangines funkcijas potencialui

$$V(r) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r < 1.5; \\ 10, & 1.5 \leq r < 2; \\ 0, & r \geq 2 \end{cases}$$

duotam energijų intervale $0.01 \leq E \leq 20$, esant a) $l = 0$; b) $l = 1$; c) $l = 2$; d) $l = 10$. Pradėkite nuo 20 deskriptoriaus.

8.7. Nubrėžkite stūmos potencialo

$$V(r) = \begin{cases} 10, & 0 \leq r < 6; \\ 0, & r \geq 6 \end{cases}$$

radikaliąsias bangines funkcijas, kai judesio kiekio momentas $l = 0$, esant energijų intervalui a) $1 \leq E \leq 10$, b) $11 \leq E \leq 20$. Pradėkite nuo 20 deskriptoriaus.

8.8. Nubrėškite iš dalies išsklaidytąsias bangas $\eta_l(r, \vartheta)$ esant sklaidos potencialui

$$V(r) = \begin{cases} 6, & 0 \leq r < 2; \\ 0, & r \geq 2 \end{cases}$$

ir duotoms judesio kiekio momento bei energijų vertėms: a) $l = 0, E = 7$, b) $l = 1, E = 7$, c) $l = 2, E = 7$, d) $l = 3, E = 7$, e) $l = 0, E = 8.5$, f) $l = 1, E = 8.5$, g) $l = 2, E = 8.5$, h) $l = 3, E = 8.5$, i) $l = 0, E = 10$, j) $l = 1, E = 10$, k) $l = 2, E = 10$, l) $l = 3, E = 10$, m) $l = 0, E = 11.9$, n) $l = 1, E = 11.9$, o) $l = 2, E = 11.9$, p) $l = 3, E = 11.9$. Pradėkite nuo 21 deskriptoriaus.

8.9. Duotam sklaidos potencialui

$$V(r) = \begin{cases} 3, & 0 \leq r < 2; \\ 0, & r \geq 2 \end{cases}$$

nubrėškite Argando diagramas, kai $l = 0$ ir $0.001 \leq E \leq 6$. Pradėkite nuo 9 deskriptoriaus.

8.10. Duotam sklaidos potencialui

$$V(r) = \begin{cases} 0, & 0 \leq r < 2; \\ 10, & 2 \leq r < 2.5; \\ 0, & r \geq 2.5 \end{cases}$$

nubrėškite Argando diagramas, kai $l = 1$ ir $1 \leq E \leq 20$. Pradėkite nuo 9 deskriptoriaus.

IV. Rezultatų pateikimas

1. Pateikdami ataskaitą nurodykite: laboratorinio darbo pavadinimą; savo vardą ir pavardę; laboratorinio darbo tikslą.
2. Užrašykite laboratorinio darbo užduoties sąlygą.
3. Nubrėškite sferines Beselio, Noimano ir Hankelio funkcijas, radikaliąsias bangines funkcijas, Argando diagramas.
4. Pateikite laboratorinio darbo išvadas.

5. Pasiruoškite ginti laboratorinį darbą. Tam tikslui pasirenkite atsakyti į kontrolinius klausimus.

VI. Kontroliniai klausimai

1. Kaip gaunamos pirmojo tipo Beselio funkcijos?
2. Kokios funkcijos yra turintys prasmę laisvojo judėjimo radikališios Šrėdingerio lygties sprendiniai?
3. Kokios išraiškos nusako sferinių Beselio ir Noimano funkcijų pobūdį, esant mažoms ir didelėms argumento vertėms?
4. Kam kvantinėje mechanikoje naudojamos sferinės Noimano ir Hankelio funkcijos?
6. Kokiomis funkcijomis naudojamosi nusakant susietųjų būsenų bangines funkcijas ne potencialo duobėje?
7. Kokius sąryšius randame iš funkcijos ir jos išvestinės tolydumo sąlygų?
8. Kam lygūs bangos skaičiai potencialo veikimo srityse?
9. Kokioms energijos vertėms egzistuoja sprendiniai, atitinkantys susietąsias būsenas?
10. Kokia yra radikaliųjų banginių funkcijų normavimo sąlyga?
11. Koks yra būdingas susietųjų būsenų požymis?

VI. Literatūra

1. Brandt S., Dahmen H. D. (1993). *Iliustruotoji kvantinė mechanika*. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas. P. 169–186.
2. Brandt S., Dahmen H. D., Stroh T. (2003). *Interactive Quantum Mechanics*. New York: Springer-Verlag. P. 152–178, 183–184.
3. Deveikis A. (2000). Kvantinės mechanikos kompiuteriniai laboratoriniai darbai. Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas. P. 65–71.

Interaktyviųjų kvantinių reiškinių modelių kurso laboratoriniai darbai / Saulius Mickevičius. – Kaunas: Vytauto Didžiojo universitetas, 2009. – 88 p.

ISBN 978-9955-12-522-8

Saulius Mickevičius

Interaktyviųjų kvantinių reiškinių modelių kurso
laboratoriniai darbai

Redaktorė Simona Grušaitė
Maketuotoja Janina Baranavičienė

2009-11-05. Išleido Vytauto Didžiojo universitetas
S. Daukanto g. 27, LT-44249 Kaunas