УДК 537.8+372.854

ФОРМИРОВАНИЕ ОСНОВНЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

И.В. Рыжов, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики и астрономии,
И.С. Косова, кандидат педагогических наук, доцент кафедры алгебры,
Н.А. Васильев, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики и астрономии,
Л.В. Жуков, доктор педагогических наук, профессор кафедры теоретической физики и астрономии
Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург (Россия)
В.Н. Аниськин, кандидат педагогических наук, профессор кафедры информатики, прикладной математики и методики их преподавания
Поволжская государственная социально-гуманитарная академия, Самара (Россия)

Аннотация. Формирование основ квантовой механики у студентов невозможно без приобретения ими знаний и умений для решения соответствующих задач по данному разделу теоретической физики. Вместе с тем, в квантовой механике точное решение задач не всегда возможно, особенно если это нестационарные и многочастичные задачи. Разработаны различные приближенные методы (теория возмущений, вариационный метод, квазиклассическое и адиабатическое приближения) для решения квантовомеханических задач.В некоторых случаях возможно сведение задач, которые изучаются в стандартном курсе квантовой механики, к решению одномерного уравнения Шредингера, но метод разделения переменных является, по сути, исключительным, и подобные решения могут иметь особые свойства, не характерные для решений общего вида. Количество методов решения, применяемых к этому классу задач, ограничено. В данной статье показано, что ряд основных представлений квантовой механики может быть сформирован у студентов без предварительного изучения её математического аппарата, путём использования волн де Бройля.

Ключевые слова: основы квантовой механики; уравнение Шредингера для одной частицы; метод потенциалов нулевого радиуса; волны де Бройля, туннельный эффект; уширение уровней потенциальной ямы; метод решения квантовомеханических задач.

Усвоение студентами основных идей и выводов квантовой механики невозможно без решения определенного набора задач. Однако в квантовой механике точное решение задачи имеется в сравнительно редких случаях. Например, стационарное уравнение Шредингера для одной частицы разрешимо для потенциала гармонического осциллятора, прямоугольной потенциальной ямы, кулоновского потенциала и в некоторых других задачах [1-4], решение которых требует от студентов достаточно высокого уровня математической культуры и больших затрат времени. Ещё сложнее обстоит дело с нестационарными и многочастичными задачами. Для решения реальных квантовомеханических задач разработаны различные приближенные методы (среди них теория возмущений, вариационный метод, квазиклассическое и адиабатическое приближения). Некоторые потенциалы, обладающие пространственной симметрией, допускаютразделение переменных, и задача сводится к решению одномерного уравнения Шредингера (подобные задачи изучаются в стандартном курсе квантовой механики). Однако метод разделения переменных сам является исключительным, и решения такого рода могут обладать различными особыми свойствами, которые не характерны для решений общего вида. Таким образом, число методов решения, которые могут быть применены к достаточно широкому классу задач, невелико.

В связи с этим представляет интерес метод потенциалов нулевого радиуса, который существенно упрощает решение задач благодаря тому, что часть решения заменяется применением граничного условия «сшивания» [4], позволяя расширить круг решаемых студентами задач. Этот метод применим как к трёхмерным, так и к одномерным задачам (эти задачи мы и будем рассматривать в нашей работе), с его помощью можно решать нестационарные задачи, исследовать как дискретный, так и сплошной спектр. Для многих важных задач квантовой механики, когда обычные приближенные методы неприменимы, аналогичные задачи с потенциалами нулевого радиуса оказываются точно разрешимыми, поскольку при решении задач не делается приближений. На их примере удобно исследовать различные принципиальные и иногда довольно тонкие вопросы теории. Этот метод позволяет точно учесть эффекты, связанные с многократным рассеянием (в том числе на бесконечном числе рассеивателей), различные вопросы взаимодействия сплошного и дискретного спектров, действие на физические системы различного рода возмущений, которые не являются малыми, и т.д. Ознакомление студентов с методом потенциалов нулевого радиуса, хотя бы на примере его одномерного варианта, существенно расширяет возможности изучения физических явлений [1 – 4]. Начальное знакомство с этим методом не требует от студентов большой математической подготовки и доступно практически всем уже на начальной стадии изучения квантовой механики, при этом студенты должны иметь представление о потенциале нулевого радиуса, волне де Бройля и условиях её сшивания в точках разрыва на потенциалах.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы показать, что ряд основных представлений и результатов квантовой механики может быть получен на базе использования только волн де Бройля, без предварительного изучения её математического аппарата.

Согласно гипотезе де Бройля частицы наряду с корпускулярными обладают и волновыми свойствами. Обобщим известное понятие о волновой функции де Бройля, считая, что на любом отрезке, где потенциал постоянен $V(x) = V_0$, стационарная волновая функция состояния с энергией E даётся формулой:

$$\Psi_E(x,t) = \exp(-iEt/\hbar)\Phi_E(x),$$

$$\Phi_E(x) = c_1 \exp(ikx) + c_2 \exp(-ikx), \text{ где } k = \sqrt{2m(E - V_0)/\hbar^2}.$$

Расширение области действия этого выражения на классически запрещённую область, когда $E_0 < V_0$, позволяет корректно описывать локализованные состояния [4] и конструировать волновую функцию с учётом естественных требований к ней:

1. Волновая функция должна быть непрерывна вместе со своей первой производной. Данное требование наиболее существенно в точках разрыва потенциала. Поэтому эти требования ещё называют условиями «сшивания» волновых функций.

2. Волновая функция должна быть ограничена по модулю, то есть $\left|\Psi(x,t)\right|$ не может обращаться в бесконечность или неограниченно возрастать при стремлении x к бесконечности.

Потенциал нулевого радиуса или δ- образный потенциал в одномерных задачах представляется в виде $V\left(x\right)=\pm V_0 a\delta_a\left(x-x_0\right)$. В этой формуле функция $\delta_a\left(x-x_0\right)$ описывает потенциал единичной площади с шириной a, центрированный в точке x_0 и большой глубиной (высотой) V_0. В зависимости от знака перед V_0, потенциал $V\left(x\right)$ называют потенциальной ямой или потенциальным барьером. Ширину потенциала a считают достаточно малой, так что изменением Ψ- функции, описывающей состояние частицы, на ее протяжении можно пренебречь. Энергия δ- потенциала, для подобных задач, много больше энергии частиц V_0=|E|. Площадь потенциальной энергии под барьером $S=V_0 a$ определяет основные свойства такой системы. Будем в дальнейшем использовать связанный с ней параметр Ω (мощность потенциальной ямы) $\Omega=\left(m/\hbar^2\right)S$. При условии, что ширина a барьера стремится к нулю, а его площадь имеет вполне реальное значение условие «сшивания» будет иметь вид:

$$\begin{cases}\Phi'(x_0+0)-\Phi'(x_0-0)=2\Omega\Phi(x_0\pm 0),\\ \Phi(x_0+0)-\Phi(x_0-0)=0.\end{cases}$$

В этом выражении центр потенциального барьера помещен в точку с координатой x_0, а символ $x_0\pm 0$ означает предел справа или слева. При этом, однако, точки, в которых берётся соответствующая функция при предельном переходе, всегда остаются вне потенциала. Тем самым влияние потенциального барьера сводится к наличию скачка (нарушению непрерывности) производной Ψ- функции при сохранении непрерывности самой функции. Таким образом, довольно трудоемкую предельную процедуру решения задач внутри барьера с двумя условиями сшивания на его границах, можно заменить одним очень простым условием сшивания на потенциале. Следует отметить, что мы получили это граничное условие, рассматривая уравнение в непосредственной окрестности потенциальной стенки, поэтому оно должно удовлетворяться и в том случае, когда дополнительно имеется какой-либо гладкий потенциал $V\left(x\right)$, а также любые граничные условия, наложенные в каком-либо ином месте.

Рассмотрим применение этой схемы на примере одномерных задач рассеяния (прохождении и отражении частицы через потенциальную систему). В связи с этим, у студентов необходимо сформировать начальные представления о стационарных и нестационарных задачах прохождения и отражения частицы на δ- образных потенциалах.

Например, если мы рассматриваем стационарные состояния частицы с энергиями, превышающими потенциальную энергию на бесконечных расстояниях ($V(\infty)=0$), то постановка задачи будет следующей: слева на данный полупрозрачный δ- образный потенциальный барьер падает поток частиц с энергией E, который частично его проходит, и частично от него отражается. Слева, вдали от барьера, волновая функция имеет вид: $\Phi(x)=Ae^{-ikx}+Be^{ikx}$, где Ae^{ikx} описывает падающий поток частиц (прямая волна), а Be^{-ikx} – отражённый (обратная волна). Справа, вдали от барьера, волновая функция имеет вид: $\Phi(x)=Ce^{ikx}$, где прямая волна Ce^{ikx} описывает прошедший поток частиц (отсутствие в этой области обратной волны соответствует отсутствию падающего справа потока). Амплитуда падающей слева волны A определяет плотность падающего потокаи задается условием эксперимента. Энергия E и волновое число $\hbar$ частицы связаны между собой соотношением $E=\hbar^2k^2/2m$. Коэффициент прохождения T (отражения R) через потенциальный барьер (т.е. вероятность частице отразиться или пройти барьер) равен отношению плотности вероятности прошедшего потока j_C (отраженного потока j_B) к плотности вероятности падающего j_A ($R=j_B/j_A, T=j_C/j_A$), где:

$$j_A=\frac{\hbar k}{m}\left|A\right|^2,\ j_B=\frac{\hbar k}{m}\left|B\right|^2,\ j_C=\frac{\hbar k}{m}\left|C\right|^2.$$

Для нестационарной задачи в соответствии с принципом суперпозиции, волновая функция, описывающая произвольное состояние частицы в данной системе, может быть представлена линейной комбинацией стационарных функций. Поскольку волновое число k является в данном случае непрерывной переменной, то суперпозиция записывается в виде интеграла:

$$\Psi\left(x,t\right)=\int_0^\infty \Psi\left(k;x,t\right)dk,\quad \text{где}$$

$$\Psi\left(k;x,t\right)=\exp\left(-i\omega\left(k\right)t\right)\Phi\left(k;x\right),\quad \omega\left(k\right)=\hbar k^2/(2m).$$

Нестационарная задача позволяет рассматривать кинетику волнового пакета при его взаимодействии с потенциалами нулевого радиуса. Применение определения волновой функции совместно с условиями «сшивания» ее на δ- образных потенциалах сводит задачу к решению линейных алгебраических систем уравнений для коэффициентов при волновой функции.

Приведём примеры некоторых одномерных задач, которые могут решаться в курсе квантовой механики без использования уравнения Шредингера, в рамках расширенного понимания волн де Бройля [4]:

№ 1. Эволюция волнового пакета частицы в пустом пространстве, обладающем постоянным потенциалом V_0 (например, $V_0 = 0$);

№ 2. Вероятности прохождения, отражения и эволюция волнового пакета частицы на δ-образном потенциальном барьере или яме;

№ 3. Локализованные стационарные состояния энергии δ- образной потенциальной ямы;

№ 4. Влияние близлежащей, бесконечной, непроницаемой стенки на уровень энергии δ-образной потенциальной ямы;

№ 5. Уровни энергии двойной δ-образной потенциальной ямы. Влияние расстояния между ямами на их уровни энергии;

№ 6. Вероятности прохождения, отражения и эволюция волнового пакета частицы при прохождении через потенциальную яму с полупроницаемыми стенками в виде δ- образного потенциала;

№ 7. Одномерный кристалл. Зонная структура. Разрешенные и запрещенные зоны энергий. Дираковская потенциальная «гребёнка». Расщепление разрешенных энергетических зон одномерных кристаллов с двумя центрами и т.д.

Покажем некоторые результаты решения задач №2 и № 6.

Туннельный эффект (см. задача №2). На рис. 1 представлен график вероятности $T(k)$ прохождения частицей (набегающей слева) полупрозрачного δ -образного потенциала:

$$T(k) = k^2/(k^2 + \Omega^2).$$

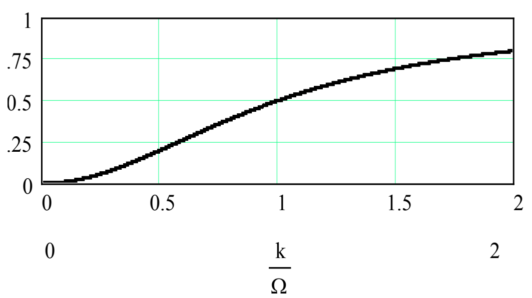

Рисунок 1

Переходя к энергии частицы $E = \hbar^2 k^2/2m$ и вводя новый параметр $E_\Omega = \hbar^2 \Omega^2/2m$ (характерную энергию барьера), получаем:

$$T = E/(E + E_\Omega) = E/E_\Omega/(E/E_\Omega + 1).$$

Если E=E_Ω (k= Ω), то $T \to 0$ и потенциальный барьер почти непроницаем. В этом случае мы имеем практически полное отражение частиц от барьера. Если параметры E=E_Ω (k= Ω), то $T \to 1$ и потенциальный барьер практически прозрачен. Если же $E = E_\Omega$, то вероятность прохождения $T = 1/2$.

Уширение уровней потенциальной ямы (см. задача №6). На рис. 2 представлен график вероятности $T(k)$ прохождения частицей (набегающей слева) потенциальной ямы со стенками в виде полупрозрачных δ- образных потенциалов в точках $x = 0$ и $x = d$:

$$T(k) = \frac{(k/\Omega)^4}{\left[(k/\Omega)^2 - 2\sin^2(kd)\right]^2 + 4\left(k/\Omega + \sin(kd)\cos(kd)\right)^2}.$$

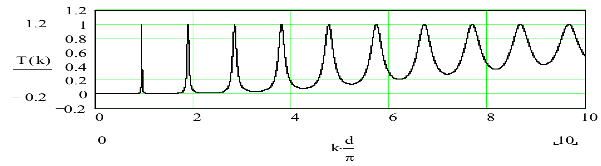

Рисунок *2*

Из графика видно, что вероятность прохождения частицей сквозь такую преграду имеет максимумы (резонансы) в точках $k \approx (\pi n/d) - (\pi n/\Omega d^2)$ отстоящих от положения уровня $k \approx \pi n/d$ потенциальной ямы на расстоянии $\Delta k = -\pi n/\Omega d^2$. С ростом номера уровня n ($n = 0,1,2,\ldots$) возрастает ширина уровня $(\pi n/4\Omega d)^2$ [4]. Уширение связано с возможностью выхода частицы через полупрозрачные потенциальные стенки ямы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Том 1. М.: Мир, 1974. 341 с.
2. Галицкий В.М., Карнаков Б.М., Коган В.И. Задачи по квантовой механике. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Наука, 1992. 880 с.
3. Демков Ю.Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: Изд. ЛГУ, 1975. 240 с.
4. Зайцев А.И. Волны де Бройля и решение задач по квантовой механике. Учебноепособие. – СПб.: ООО «Теза», 2004. 237 с.

FORMATION OF THE MAIN REPRESENTATIONS ABOUT QUANTUM MECHANICS

I.V. Ryzhov, Candidate of Physico-mathematical Sciences, Professor at the Department «Theoretical Physics and Astronomy»,
I.S. Kosova, Candidate of Pedagogical Sciences, Assistant Professor at the Department of «Algebra»
N.A. Vasilyev, Candidate of Physico-mathematical Sciences, Professor at the Department of «Theoretical physics and astronomy»,
L.V. Zhukov, Doctor of Pedagogical Sciences, Professor at the Department «Theoretical physics and astronomy»,
Russian State Pedagogical University A.I.Gertsen, St. Petersburg (Russia)
V.N. Aniskin, Candidate of Pedagogic Sciences, Associate Professor, Professor at the Department «Informatics, Applied Mathematics and Technique of Their Teaching»,
Samara State Academy of Social Sciences and Humanities, Samara (Russia)

Abstract. Formation of quantum mechanics bases is impossible without acquisition of knowledge and abilities for the solution of the corresponding tasks in this section of theoretical physics. At the same time, the exact solution of tasks is not always possible in quantum mechanics, especially if they are non-stationary and multipartial tasks. Various approximate methods (the theory of perturbations, a variation method, quasiclassical and adiabatic approximations) are developed for the solution of quantum mechanical problems. Sometimes tasks which are studied in a standard course of quantum mechanics can be solved by the one-dimensional equation of Schrödinger, but the division method of variables is, in fact, exclusive, and similar decisions can have special features, which are not characteristic for solutions of a general kind. The quantity of the solution methods applied to this class of problems is limited. In this article it is shown that a number of the main representations of quantum mechanics can be created without preliminary studying of its mathematical apparatus, by use of de Broil waves.
Keywords: bases of quantum mechanics; Schrödinger's equation for one particle:, a method of potentials of zero radius; de Broil wave, tunnel effect; levels broadening of a potential hole; a method of the solution of quantum mechanical problems.

УДК 532/533

РЕШЕНИЕ ОДНОМЕРНЫХ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА – БЛОХА

И.В. Рыжов, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики и астрономии
Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург (Россия)
А.А. Васильев, учебный мастер управления информационных технологий
Санкт-Петербургская академия постдипломного педагогического образования, Санкт-Петербург (Россия)
Н.А. Васильев, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики и астрономии,
И.С. Косова, кандидат педагогических наук, доцент кафедры алгебры,
Л.В. Жуков, доктор педагогических наук,профессор кафедры теоретической физики и астрономии
Российский государственный педагогический университет им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург (Россия)
В.Н. Аниськин, кандидат педагогических наук, профессор кафедры информатики, прикладной математики и методики их преподавания
Поволжская государственная социально-гуманитарная академия, Самара (Россия)

Аннотация. В статье предпринята попытка составления алгоритма с условным названием разностного оператора решений S, для вычисления значений сеточных функций $R_{x,t}$, $E_{x,t}$, удовлетворяющеготаким условиям, как:

$\max \| R_{x,t} - R(x,t) \| \to 0$, $\max \| E_{x,t} - E(x,t) \| \to 0$, где $\| \cdot \|$ означает норму соответствующих величин.

Ключевые слова: нелинейная оптика; уравнения Максвелла – Блоха; задача Коши; вычисление значений сеточных функций; одношаговые вычислительные правила последовательного повышения точности результата; вычислительные правила наивысшей алгебраической степени точности.

Постановка задачи и основные определения.

В нелинейной оптике можно выделить целый класс задач, которые описываются одномерными нелинейными уравнениями Максвелла – Блоха, например, типа:

$$R(x,t)_t = f(x,t,R,E), \quad (1)$$

$$E(x,t) = \int_0^L R(\xi,t) \cos|x-\xi| \, d\xi, \quad (2)$$

где нижний индекс t в левой части уравнения (1) означает частную производную по времени. Как правило, точное решение этой системы уравнений не удается выразить через элементарные функции. Обычно в таких ситуациях приходится прибегать к помощи приближенных методов решения.

Пусть требуется найти решение системы уравнений (1), (2), удовлетворяющее начальным условиям:

$$R(x,0) = r(x), \quad E(x,0) = e(x). \quad (3)$$

Условия существования и единственности решения поставленной задачи Коши будем считать выполненными. Предположим, что $R(x,t)$ и $E(x,t)$ есть точное решение уравнений (1) – (3), обладающее в ограниченной (с границей $G \in \{x=0, x=L; t=0, t=T\}$) области изменения своих аргументов Q необходимой гладкостью $D = Q + G$.