Projekt nr C.7.1

Metoda różnicowa rozwiązywania zależnego od czasu równania Schrödingera dla cząstki w studni potencjału i polu elektrycznym

Wprowadzenie

Podstawy fizyczne i numeryczne

Rozważamy zależne od czasu równanie Schrödingera, opisujące jednowymiarowy ruch cząstki. Znajdujemy jego rozwiązanie metodą różnicową. Wprowadzając atomowe jednostki długości, energii i czasu, tzn. przyjmując formalnie $\hbar = 2m = 1$, możemy zapisać zależne od czasu równanie Schrödingera w postaci:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\hat{H}\psi \tag{1}$$

Hamiltonian $\hat{H}$ jest sumą operatorów energii kinetycznej i potencjalnej:

$$\hat{H} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \tag{2}$$

Wprowadzamy następującą dyskretyzację zmiennych:

$$x \in [a,b] \to x_k = a + kh,\ k = 0,\ldots,N \tag{3}$$

$$t \to t_l = l\Delta t,\ l = 0,1,2,\ldots \tag{4}$$

Przybliżenie różnicowe równania (1) ma postać:

$$\frac{\psi_k^{l+1} - \psi_k^l}{\Delta t} = -\hat{H}_k\left[\frac{i}{2}\left(\psi_k^{l+1} + \psi_k^l\right)\right]. \tag{5}$$

gdzie operator $\hat{H}_k$ definiujemy za pomocą równania:

$$\hat{H}_k\psi_k^l = \frac{1}{h^2}\left(2\psi_k^l - \psi_{k-1}^l - \psi_{k+1}^l\right) + U_k\psi_k^l. \tag{6}$$

Na podstawie (5) i (6) otrzymujemy równanie:

$$\psi_k^{l+1} = \left(\frac{1 - \frac{i}{2}\hat{H}_k\Delta t}{1 + \frac{i}{2}\hat{H}_k\Delta t}\right)\psi_k^l \tag{7}$$

które przekształcamy do postaci:

$$\psi_k^{l+1} = \left(\frac{2}{1 + \frac{i}{2} \hat{H}_k \Delta t} - 1 \right) \psi_k^l \equiv \chi_k^l - \psi_k^l, \tag{8}$$

gdzie funkcje pomocniczą χ_k^l definiujemy za pomocą relacji:

$$\left(1 + \frac{i}{2} \hat{H}_k \Delta \ t \right) \chi_k^l = 2\psi_k^l. \tag{9}$$

Korzystając z definicji operatora $\hat{H}_k$ otrzymujemy równanie:

$$\chi_{k-1}^l + \left(\frac{2ih^2}{\Delta t} - 2 - h^2 U_k \right) \chi_k^l + \chi_{k+1}^l = \frac{4ih^2}{\Delta t} \Psi_k^l \ , \tag{10}$$

które można sprowadzić do układu równań liniowych o macierzy trójdiagonalnej. Układ ten można rozwiązać za pomocą dostępnych procedur numerycznych.

Problemy fizyczne

Cząstka w studni potencjału

Rozwiązujemy równanie Schrödingera dla cząstki w prostokątnej skończonej studni potencjału. Można przyjąć np. szerokość studni = 50 a_B (promień Bohra) i głębokość = 0.1 Ry (rydberg). Obliczenia prowadzimy w przedziale [a,b] znacznie szerszym od szerokości studni, np. 500 a_B, aby uniknąć wpływu granic tego przedziału. W chwili początkowej $t = 0$ umieszczamy w studni potencjału cząstkę opisaną funkcją falową o kształcie funkcji Gaussa. Rozwiązujemy numerycznie równania (9) i (10) w celu uzyskania ewolucji czasowej pakietu falowego. W wyniku powinniśmy otrzymać stopniowe rozmywanie się funkcji falowej wewnątrz studni potencjału.

Wpływ pola elektrycznego

Ciekawym rozwinięciem powyższego problemu jest wprowadzenie dodatkowo statycznego jednorodnego pola elektrycznego, co oznacza dodanie do energii potencjalnej wyrazu Fx, gdzie F jest natężeniem pola elektrycznego (w jednostkach atomowych). Należy przeprowadzić symulację ewolucji czasowej układu dla różnych wartości F. Dla odpowiednio dużej wartości F powinniśmy zobaczyć, że po upływie czasu rzędu kilku jednostek atomowych cząstka „ucieka” ze studni potencjału w kierunku malejącego x, tzn. znaczna część funkcji falowej cząstki przemieszcza się w tym kierunku poza obszar studni potencjału. Możemy w ten sposób obserwować tzw. kwantowe tunelowanie cząstki przez barierę potencjału.

Zadania do wykonania

1. Napisać program, który po wczytaniu danych wejściowych (szerokość i głębokość studni potencjału, wartości kroków h i Δt, liczba iteracji) rozwiązuje zależne od czasu równanie Schrödingera dla cząstki w prostokątnej studni potencjału. Początkowy kształt funkcji falowej przyjąć w postaci gaussowskiej.
2. Wprowadzić dodatkowo pole elektryczne o zadanym natężeniu F i wyznaczyć ewolucję czasową układu dla różnych wartości F. Prawdopodobieństwo P znalezienia cząstki w obszarze studni potencjału powinno maleć w przybliżeniu eksponencjalnie, czyli $P \sim exp(-t/\tau)$, gdzie τ jest czasem życia cząstki w studni potencjału. Sprawdzić tę zależność i wyznaczyć czas życia τ jako funkcję parametrów studni potencjału i natężenia pola elektrycznego.
3. Sprawdzić, czy użyty w równaniu (8) operator ewolucji czasowej zachowuje unormowanie funkcji falowej.
4. Za pomocą dowolnej procedury graficznej narysować kształt funkcji falowej dla różnych chwil czasu.

Literatura

Wykład