Projekt nr C.7.9

Symulacja rozpraszania cząstki na prostokątnym progu potencjału

Teoria

W doświadczeniu zderzenia cząstki o energii E z barierą potencjału o wysokości V_0, mechanika klasyczna przewiduje, że cząstka taka zostanie odbita od bariery w przypadku gdy $E<V_0$ oraz przejdzie przez barierę w przypadku gdy $E>V_0$. W mechanice kwantowej natomiast da się tylko określić *prawdopodobieństwo* odbicia i przejście przez barierę.

Analityczne rozwiązanie tego problemu opiera się na wykorzystaniu stacjonarnych rozwiązań niezależnego od czasu równania falowego dla konkretnej wartości energii cząstki padającej [1]. Znacznie ciekawsze jednak jest przyjęcie za punkt wyjścia równania Schrödingera zależnego od czasu:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x,t)\psi(x,t)\,, \tag{1}$$

które jest co prawda bardziej skomplikowane ale za to dostarcza możliwości badania ruchu opisującej cząstkę kwantową paczki falowej i obserwację w jaki sposób ulega ona odbiciu przy oddziaływaniu z potencjałem.
W równaniu (1) $V(x,t)$ jest (na ogół niezależną od czasu) energią potencjalną oddziaływania cząstki z otoczeniem, zaś $\psi(x,t)$ jest funkcją falową, której kwadrat modułu daje informację o gęstości prawdopodobieństwa $\rho(x,t)$ znalezienia cząstki w miejscu x w chwili t:

$$\rho(\mathrm{x},\mathrm{t}) = \psi^*(x,t)\psi(\mathrm{x},\mathrm{t})\,. \tag{2}$$

W najprostszym jednowymiarowym przypadku kształt potencjału na którym następuje rozproszenie cząstki można przyjąć w postaci prostokątnej bariery o wysokości V_0 i szerokości a:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \Leftrightarrow \quad |x| > a/2, \\ V_0 & \Leftrightarrow \quad |x| < a/2. \end{cases} \tag{3}$$

Wówczas prawdopodobieństwo odbicia od bariery R i transmisji przez barierę T można wyznaczyć jako

$$R = \int_{-\infty}^{-a/2} \rho(x,t)dx \qquad \text{i} \qquad T = \int_{+a/2}^{+\infty} \rho(x,t)dx\,, \tag{4}$$

gdzie powyższe całki liczone są w chwili t gdy cząstka opuściła już obszar oddziaływań.

Metody numeryczne

Rachunki wygodnie prowadzić przy wyborze atomowych jednostek energii w których $\hbar = 2m = 1$. Równanie (1) rozwiążemy metodą różnicową – poprzez zastąpienie występujących w nim pochodnych odpowiednimi ich przybliżeniami, co prowadzi do schematu iteracyjnego [2]:

$$\psi(x,t+\Delta t) = \psi(x,t-\Delta t) + 2i\Delta t\cdot\left[\frac{\psi(x+\Delta x,t) - 2\psi(x,t) + \psi(x-\Delta x,t)}{(\Delta x)^2} - V(x,t)\psi(x,t)\right], \tag{5}$$

gdzie Δx i Δt dyskretyzują odpowiednio przestrzeń i czas.

Do policzenia pierwszego kroku można wykorzystać wyrażenie:

$$\psi(x,\Delta t) = \psi(x,0) + i\Delta t \cdot \left[\frac{\psi(x+\Delta x,0) - 2\psi(x,0) + \psi(x-\Delta x,0)}{(\Delta x)^2} - V(x,0)\psi(x,0) \right]. \tag{6}$$

Do wyznaczania gęstości prawdopodobieństwa $\rho(x,t)$ wygodnie jest przekształcić równanie (5) do postaci jawnie opisującej część rzeczywistą i urojoną funkcji falowej $\psi(x,t)$:

$$\begin{aligned}\Re\mathrm{e}\,\psi(x,t+\Delta t) &= \Re\mathrm{e}\,\psi(x,t-\Delta t)\\ &- 2\Delta t \cdot \left[\frac{\Im\mathrm{m}\,\psi(x+\Delta x,t) - 2\Im\mathrm{m}\,\psi(x,t) + \Im\mathrm{m}\,\psi(x-\Delta x,t)}{(\Delta x)^2} - V(x,t)\Im\mathrm{m}\,\psi(x,t) \right]\end{aligned} \tag{7a}$$

$$\begin{aligned}\Im\mathrm{m}\,\psi(x,t+\Delta t) &= \Im\mathrm{m}\,\psi(x,t-\Delta t)\\ &+ 2\Delta t \cdot \left[\frac{\Re\mathrm{e}\,\psi(x+\Delta x,t) - 2\Re\mathrm{e}\,\psi(x,t) + \Re\mathrm{e}\,\psi(x-\Delta x,t)}{(\Delta x)^2} - V(x,t)\Re\mathrm{e}\,\psi(x,t) \right]\end{aligned} \tag{7b}$$

i wówczas

$$\rho(x,t) = [\Re\mathrm{e}\,\psi(x,t)]^2 + [\Im\mathrm{m}\,\psi(x,t)]^2 . \tag{8}$$

Podobne rachunki można przeprowadzić również dla (6).

Z konieczności obliczenia trzeba prowadzić w pudle obliczeniowym, którego rozmiary powinny być dużo większe od szerokości bariery a by ustrzec się od zbyt wczesnej interferencji cząstki odbitej od jego brzegów z samą sobą.

Zadania do wykonania

1. Proszę napisać program rozwiązujący równanie (1) z potencjałem (3) metodą różnicową z wykorzystaniem przybliżeń (5) i (6) prezentujący ewolucję czasową gęstości prawdopodobieństwa (8).
2. Jako test proszę zaobserwować ewolucję czasową (a właściwie jej brak) gęstości prawdopodobieństwa dla rozwiązań równania Schrödingera *bez czasu* dla nieskończonej studni potencjału.
3. W środku pudła obliczeniowego uformować gaussian
   $$\psi(x,0) = A\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2} \right)$$
   i obserwować ewolucje czasową gęstości prawdopodobińśtwa (8). Stałą normalizacyjną A proszę wyznaczyć z warunku:
   $$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x,0)\,dx = 1 .$$
4. Wewnątrz pudła obliczeniowego proszę wstawić próg potencjału (3) i ten sam gaussian „popchnąć'' w prawą stronę
   $$\psi(x,0) = \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2} \right)\exp(ikx) .$$
   Parametry x_0 i σ charakteryzujące gaussian dobrać tak, by w chwili początkowej w całości znajdował się on *przed* progiem.
5. Symulację prowadzić dopóki po zderzeniu z barierą cząstka całkowicie nie opuści bariery (prawdopodobieństwo znalezienia cząstki wewnątrz niej nie będzie odpowiednio małe):

$$\int_{-a/2}^{+a/2} \rho(x,t)dx < \varepsilon \, .$$

6. Zbadać wpływ parametrów symulacji (a, V_0, k) na wartości współczynnika transmisji T i odbicia R.

Literatura

[1] L. I. Schiff, *Mechanika kwantowa*, PWN (Warszawa, 1977).

[2] A. Askar, A. S. Cakmak, *J. Chem. Phys.* **68** (1978) 2794.

[3] J. Adamowski, *Wykład z metod obliczeniowych fizyki*.

[4] J. J. V. Maestri, R. H. Landau, M. J. Paez, *Am. J. Phys.* **68** (2000) 1113.