Численное моделирование дифракции электрона: квантово-механический подход и сравнение с теорией Френеля

1. Физическая постановка задачи

Цель работы: сравнить квантово-механическое распространение волновой функции электрона через щель(и) с классическим приближением дифракции Френеля–Кирхгофа для скалярных волн (например, света). Основное наблюдение: плотность вероятности $|\psi(x,y,t)|^2$ в квантовой механике играет роль, аналогичную интенсивности волны $|U(x,y,z)|^2$ в оптике.

Почему это возможно? Уравнение Шрёдингера для свободного электрона ($V = 0$):

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi,$$

после перехода к безразмерным переменным и замены времени t на продольную координату z, приводится к виду:

$$\frac{\partial u}{\partial z} = \frac{i\lambda}{4\pi}\nabla_\perp^2 u,$$

где $\lambda = h/p = 2\pi/k$ — длина волны де Бройля, а z — направление распространения. Это уравнение *математически эквивалентно* уравнению скалярной дифракции в приближении Френеля. Таким образом, **время эволюции** в уравнении Шрёдингера соответствует **расстоянию от апертуры** в оптике:

$$z = v_g(t_f - t_0) = \frac{\hbar k}{m}\Delta t,$$

где v_g — групповая скорость электрона.

2. Численная модель и реализация

2.1. Уравнение и безразмерные единицы

Рассматривается двумерное нестационарное уравнение Шрёдингера:

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r},t).$$

Для упрощения вычислений используются **безразмерные единицы**:

$$\hbar = 1, \quad m = 1.$$

В этих единицах длина волны де Бройля связана с импульсом как $\lambda = 2\pi/k$.

2.2. Начальные условия

В момент $t = t_0$ волновая функция задаётся непосредственно *за плоскостью щели*:

$$\psi(x, y, t_0) = \psi_0(x, y) \cdot \Pi(x, y),$$

где:

- $\psi_0(x, y) = e^{i(k_x x + k_y y)}$ — плоская волна, направленная вдоль оси x,
- $\Pi(x, y)$ — характеристическая функция апертуры (1 внутри щелей, 0 вне).

Такой подход исключает моделирование взаимодействия с потенциальным барьером и соответствует постановке задачи дифракции в волновой оптике.

2.3. Численный метод: схема Кранка–Николсона

Для интегрирования уравнения по времени применяется **метод Кранка–Николсона** — неявная конечно-разностная схема второго порядка точности, обладающая свойством унитарности (сохранения нормы $\int |\psi|^2 d\mathbf{r} = 1$).

Дискретизация по времени с шагом Δt приводит к системе:

$$\left(\mathbf{I} + \frac{i\Delta t}{2}\hat{H}\right)\psi^{n+1} = \left(\mathbf{I} - \frac{i\Delta t}{2}\hat{H}\right)\psi^n,$$

или в операторной форме:

$$\mathbf{A}\psi^{n+1} = \mathbf{B}\psi^n.$$

В коде это реализовано как:

```
self.psi = spsolve(self.Mat1, self.Mat2.dot(self.psi))
```

где:

- `Mat1` $= \mathbf{A} = \mathbf{I} + \dfrac{i\Delta t}{2}\mathbf{H}$,

- `Mat2` $= \mathbf{B} = \mathbf{I} - \dfrac{i\Delta t}{2}\mathbf{H}$.

2.4. Пространственная дискретизация

- Сетка: равномерная прямоугольная, $x_i = x_{\min} + i\,dx$, $y_j = y_{\min} + j\,dy$, с $dx = dy$.
- Волновая функция хранится как вектор длины $N_x N_y$, где элемент (i, j) имеет индекс $i + jN_y$.
- Лапласиан аппроксимируется пятиточечным шаблоном:

$$\nabla^2 \psi_{i,j} \approx \frac{\psi_{i+1,j} + \psi_{i-1,j} + \psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1} - 4\psi_{i,j}}{dx^2}.$$

- Граничные условия: $\psi = 0$ на всех границах области — имитация бесконечной потенциальной ямы.
- Потенциал $V(x, y)$ (если используется) задаётся как вектор той же длины и добавляется к диагонали гамильтониана.

2.5. Структура класса `WaveFunction`

Класс реализует следующие методы:

- `__init__` — инициализация сетки, начального состояния, потенциала и построение разреженных матриц $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$;
- `get_prob()` — возвращает плотность вероятности $|\psi|^2$;
- `compute_norm()` — вычисляет норму $\int |\psi|^2 dxdy$;
- `step()` — выполняет один временной шаг эволюции.

3. План сравнения с теорией Френеля

1. Выполнить квантовую эволюцию до времени t_f, соответствующего расстоянию $z = (\hbar k/m)(t_f - t_0)$.
2. Зафиксировать $|\psi(x_f, y, t_f)|^2$ — квантовая «интенсивность».
3. Вычислить классическое поле по формуле Френеля:

$$U(x, y, z) = \frac{e^{ikz}}{i\lambda z} \iint U_0(x', y') \exp\left(\frac{i\pi}{\lambda z}\left[(x - x')^2 + (y - y')^2\right]\right) dx'dy',$$

   где $U_0(x, y) = \psi(x, y, t_0)$.
4. Сравнить одномерные срезы:

$$I_{\mathrm{QM}}(y) = \int |\psi(x_f, y, t_f)|^2 dx, \quad I_{\mathrm{Fresnel}}(y) = |U(x_f, y, z)|^2.$$

5. Исследовать зависимость точности совпадения от энергии электрона, ширины щели и расстояния до экрана.