

Туннельный эффект

“Отрицательный результат – тоже результат”

Теоретические сведения

Стационарное уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$
$$-\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Соотношение неопределенностей

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$



Постановка задачи

Потенциальная энергия

$$U(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x < 1, \\ U_0, & 1 \leq x < 1 + w, \\ 0, & 1 + w \leq x < 2 + w \end{cases}$$

Краевые условия

$$\psi(x) = e^{ik(x-(1+w))}, x \geq 1 + w, k = \sqrt{E}$$

Класс решения

$$\psi \in C^1$$



Аналитическое решение

$$\psi(x) = \begin{cases} C_1 e^{ikx} + C_2 e^{-ikx}, & 0 \leq x < 1 \\ C_3 e^{\gamma(x-1)} + C_4 e^{-\gamma(x-1)}, & 1 \leq x < 1 + w, \\ e^{ik(x-(1+w))}, & 1 + w \leq x < 2 + w, \end{cases} \quad \gamma = \sqrt{U_0 - E}$$

Константы определяются
непрерывностью функции и
производной



Солвер

```
element = VectorElement("CG", interval, 2, 2)
R = FiniteElement("Real", interval, 0)
potential = FiniteElement("Lagrange", interval, 1)

psi = TrialFunction(element)      # Incremental displacement
psi_re, psi_im = split(psi)
v = TestFunction(element)
v_re, v_im = split(v)

E = Coefficient(potential)
f = Coefficient(potential)
U = Coefficient(potential)

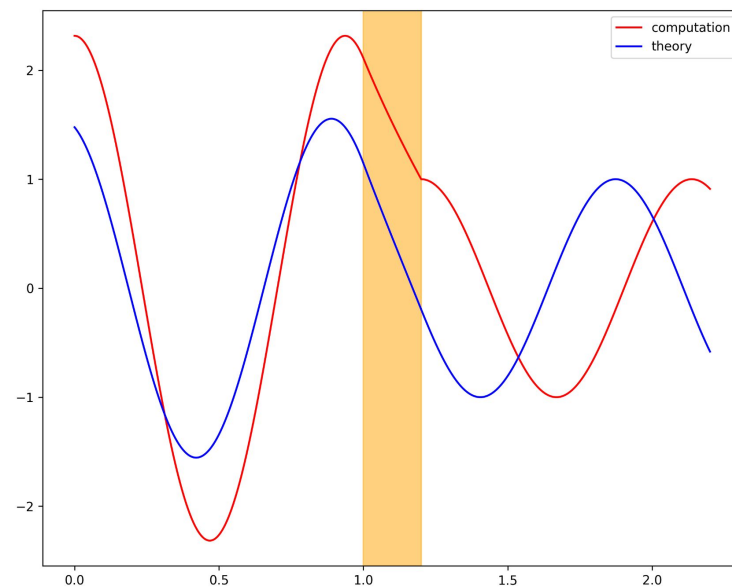
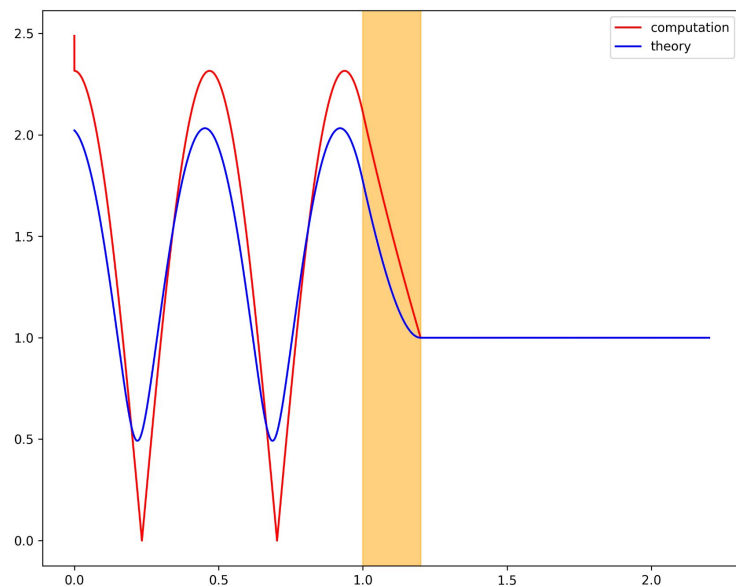
a = -inner(grad(psi_re), grad(v_re))*dx - inner(grad(psi_im), grad(v_im))*dx + \
    E*inner(psi_re, v_re)*dx + E*inner(psi_im, v_im)*dx - \
    U*inner(psi_re, v_re)*dx - U*inner(psi_im, v_im)*dx
L = inner(f, v_re)*dx + inner(f, v_im)*dx
```

Результаты

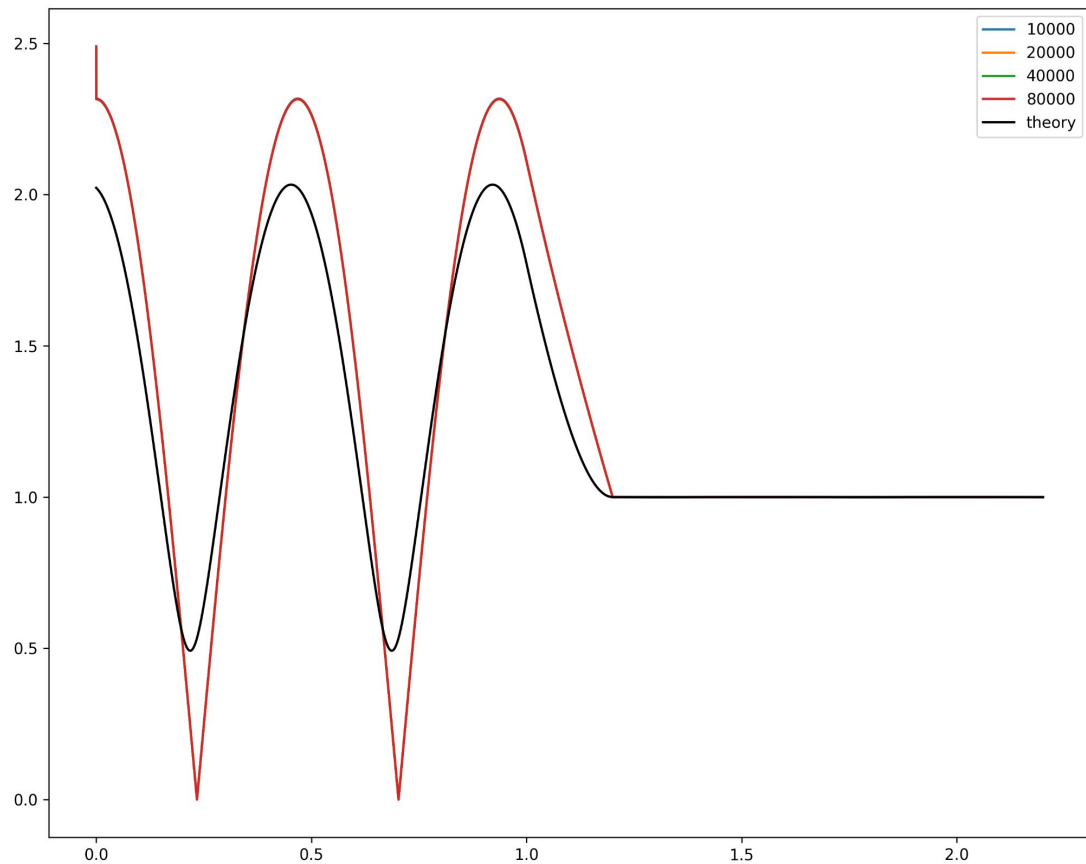
$$|\psi|$$



$$\operatorname{Re} \psi$$



Сеточная сходимость



Результат не зависит от
размера сетки.

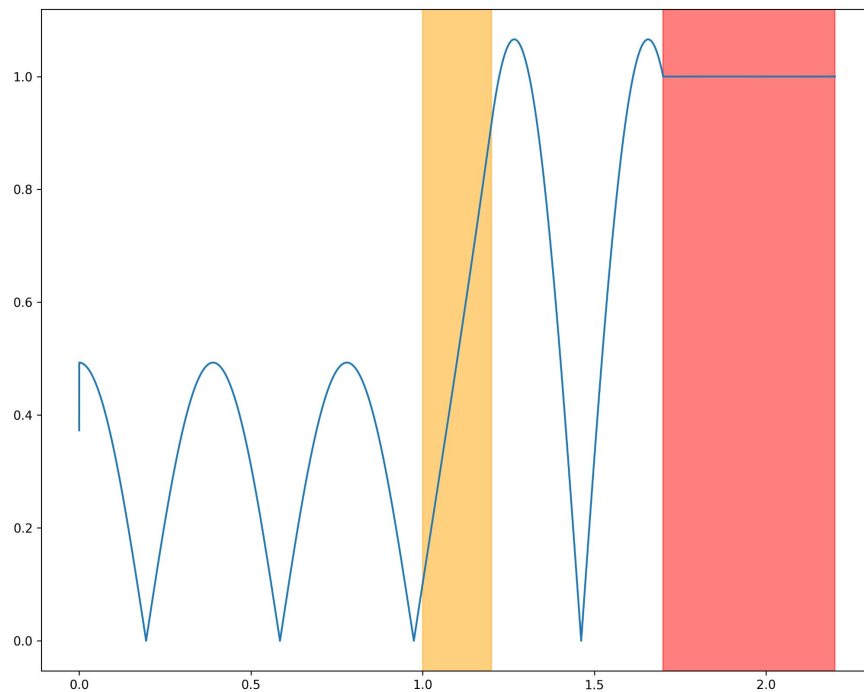
А что если...

Было

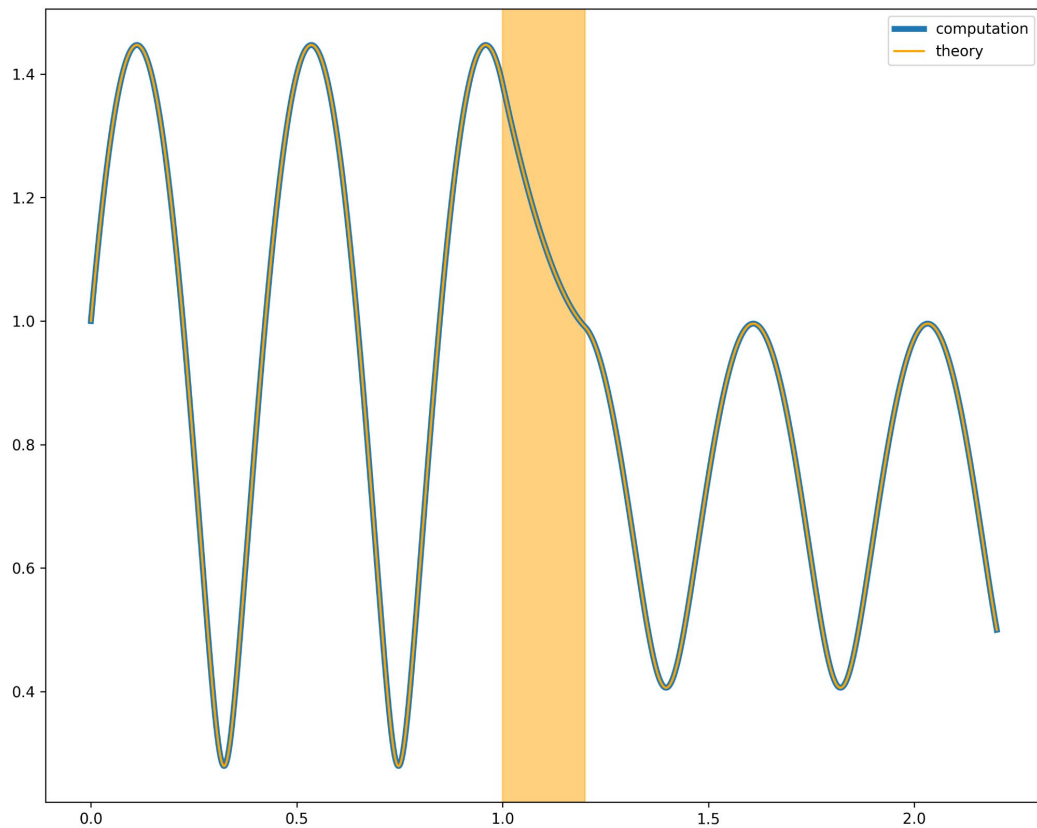
$$\psi(x) = e^{ik(x-(1+w))}, x \geq 1 + w$$

Стало

$$\psi(x) = e^{ik(x-(1+w))}, x \geq 1.5 + w$$



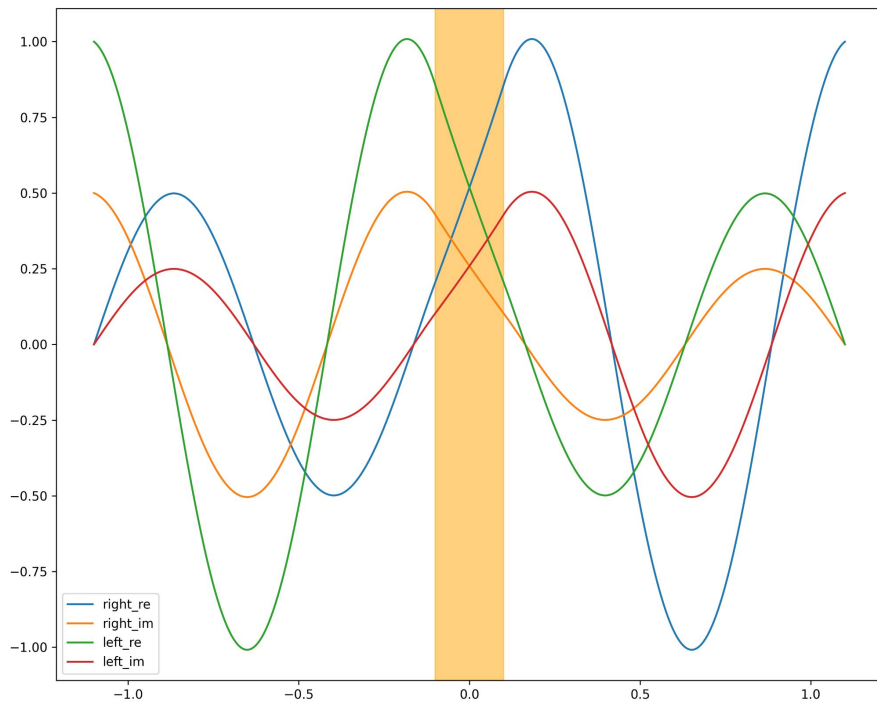
Но не все так плохо



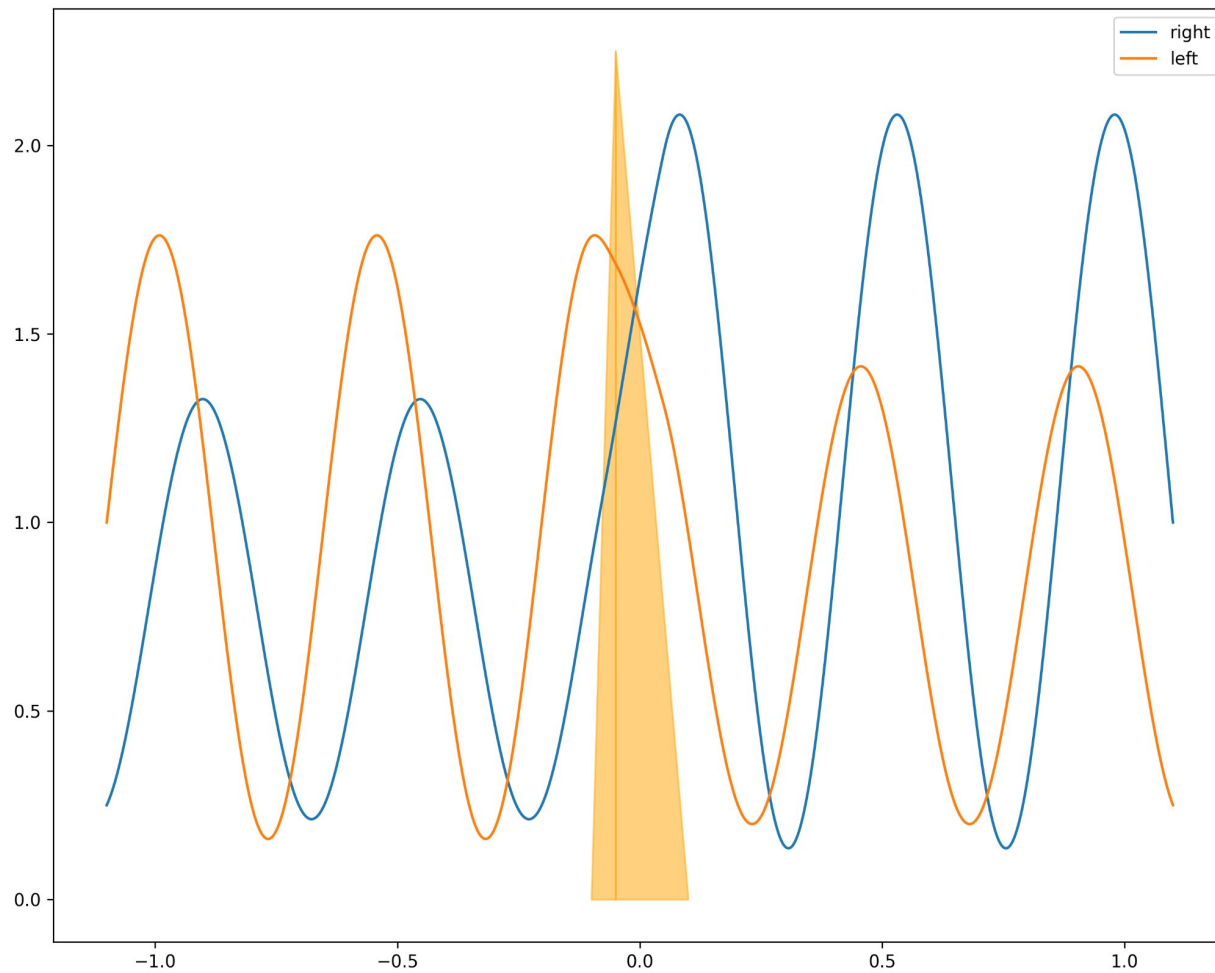
$$\psi(0) = 1$$
$$\psi(2 + w) = 0.5i$$

Асимметричный барьер

$$T = \left(\frac{A_{outgoing}}{A_{ingoing}} \right)^2$$



УВЫ



Итоги

1. FEniCS и DOLFIN подходят только для решения задач с граничными условиями заданными на краю области, чего в этом случае не достаточно
2. Удалось корректно промоделировать стационарное уравнение Шредингера в одномерном случае (на старшие размерности обобщение тривиально)
3. Не удалось получить численные результаты характеризующие туннельный эффект
4. Не удалось подтвердить утверждение про равенство коэффициентов прохождения на асимметричном барьере

Дальнейшие планы

Используя другие инструменты решить исходную задачу



Это немного, но это честная работа