Моделирование №1

Евтушенко И. Д.
Андреев А. Р.

26 июня 2022 г.

Код можно посмотреть по ссылке `https://colab.research.google.com/drive/1TQDVcZsIPKDOrxwligimz_m9H3Anokx4?usp=sharing`

1 Задание

Используя уравнение Шредингера, найти связные состояния и соответствующие им собственные значения в случае прямоугольной потенциальной ямы $V(x) = \begin{cases} -U & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$ Найти также собственные функции и собственные значения для осцилляторного потенциала $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ Построить графически собственные функции. Рассмотреть случай, когда в точке $x = 0$ вводится бесконечно узкая и бесконечная полупроницаемая перегородка. Выявить влияние такой перегородки на стационарные состояния.

2 Прямоугольная потенциальная яма

Уравнение шредингера

$$\nabla^2\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Psi = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Psi = 0 \tag{2}$$

Следовательно

$$\begin{cases} \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}E, \forall|x| > a \\ \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E + U), \forall|x| < a \end{cases} \tag{3}$$

введем дополнительные обозначения

$$k_1^2 = -\frac{2m}{\hbar}E \tag{4}$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar}(E + U) \tag{5}$$

Следовательно

$$
\begin{cases}
\Psi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} & x < -a \\
\Psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} & |x| < a \\
\Psi_3(x) = B_3 e^{-k_1 x} & x > a
\end{cases}
\tag{6}
$$

Выполним сшивание

$$
\begin{cases}
\Psi_1(-a) = \Psi_2(-a) \\
\Psi_1'(-a) = \Psi_2'(-a) \\
\Psi_2(a) = \Psi_3(a) \\
\Psi_2'(a) = \Psi_3'(a)
\end{cases}
\tag{7}
$$

Так как яма симметрична относительно 0 можно рассмотреть только правую границу

$$
\begin{cases}
\Psi_1(a) = \Psi_2(a) \\
\Psi_1'(a) = \Psi_2'(a)
\end{cases}
\tag{8}
$$

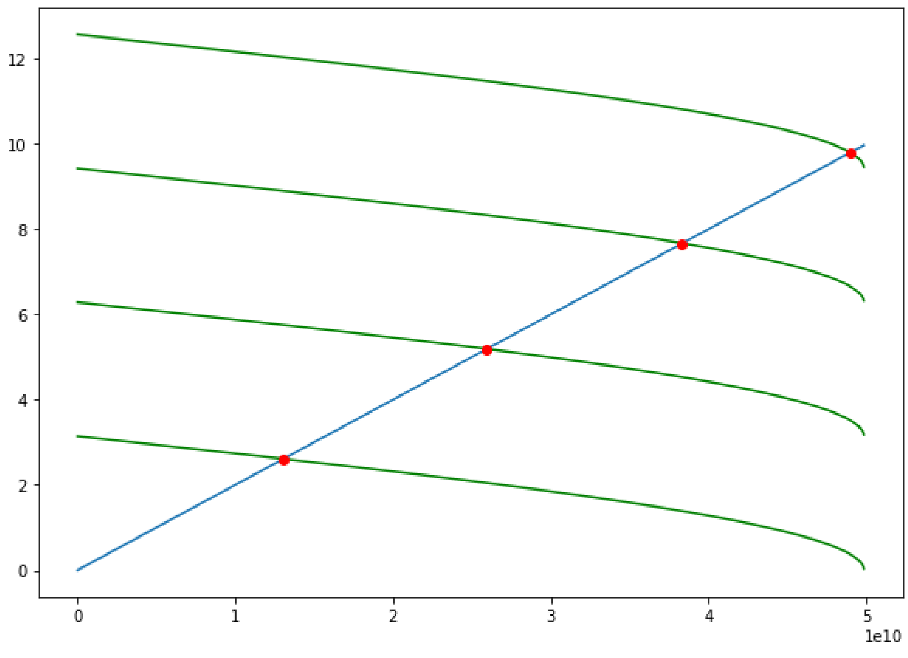
Сшивая уравнения и исключая параметр α прийдем к уравнению вида

$$
k_2 a = \pi n - 2\arcsin\left(\frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mU}}\right)
\tag{9}
$$

Так как аргумент arcsin должен лежать в промежутке от -1 до 1 мы можем найтимаксимальное значение k

$$
k_{max} = \frac{\sqrt{2mU}}{\hbar}
\tag{10}
$$

Теперь мы может решить графически наше уравнение



Полученные точки:

n	x	y
1	13060000000.000	2.612
2	25940000000.000	5.188
3	38350000000.000	7.670
4	48990000000.000	9.798

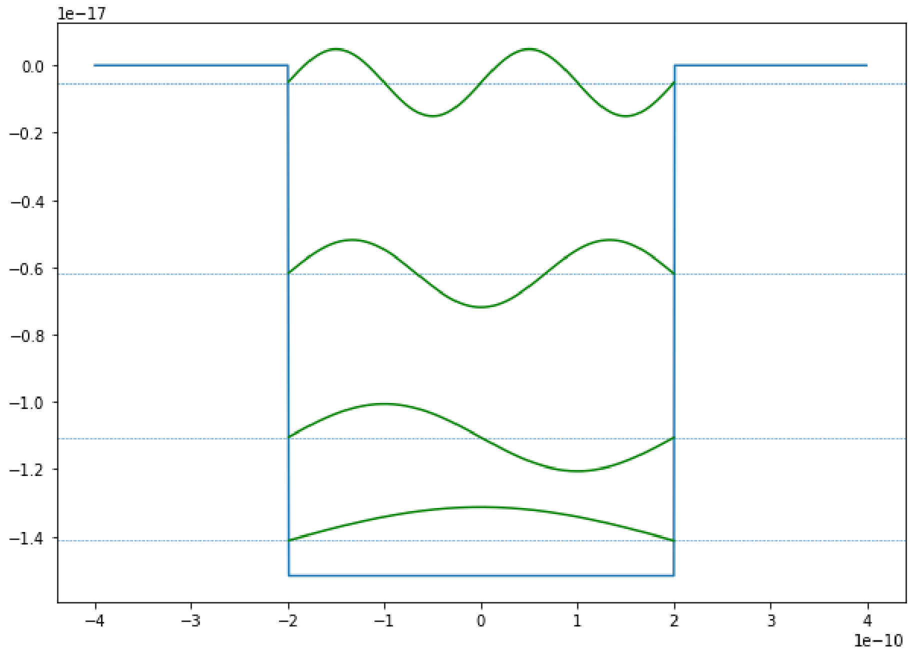
Вычислим энергетические уровни и построим Ψ функции на них

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{a}{2}} \sin(\frac{\pi n x}{a})$$

Вычисленная энергия связных состояний:

1.041e-18 4.107e-18 8.978e-18 1.465e-17



3 Осцилляторный потенциал

Уравнение шредингера для стационарных состояний одномерного осциллятора:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\Psi = E\Psi$$

Введем новую переменную

$$\xi = x\sqrt{\frac{m}{\hbar}}$$

Преобразуем уравнение шредингера

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\Psi = 0$$

Отсюда можно вывести

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$$

$$\Psi = C_n * P_n(\xi)\exp(-\frac{\xi^2}{2})$$

Вычисленная энергия связных состояний:

5.273e-35 1.582e-34 2.636e-34 3.691e-34