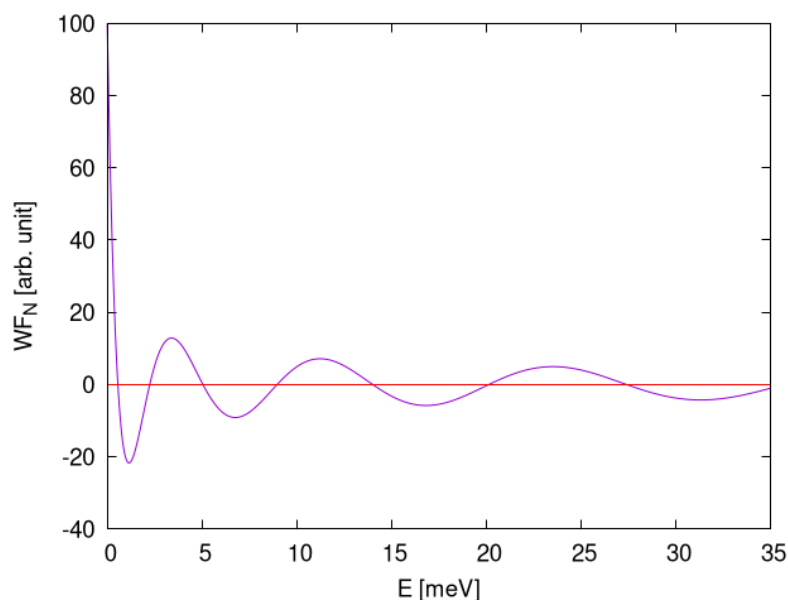


Laboratorium 1 - Stany własne hamiltonianu 1D, metoda strzałów

Piotr Żeberek | 407663 | gr. 2

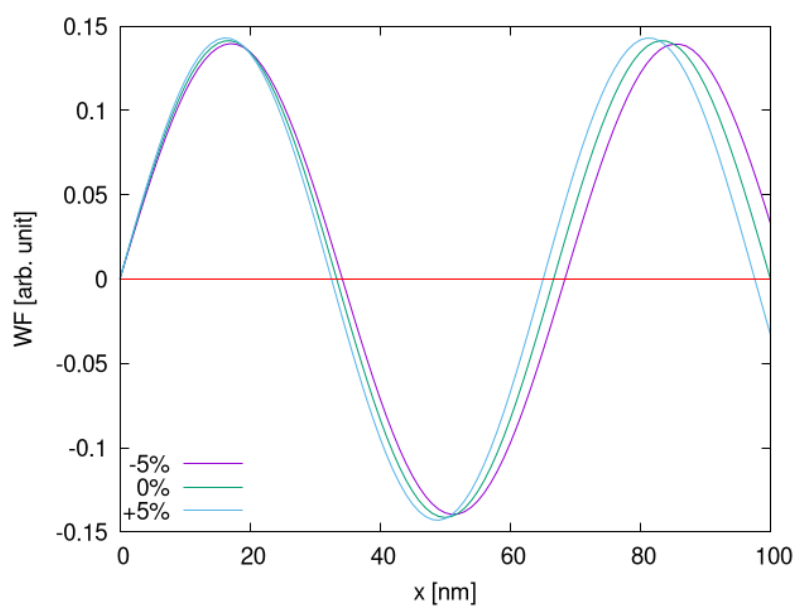
1 Funkcja falowa

1.1 Kraniec studni



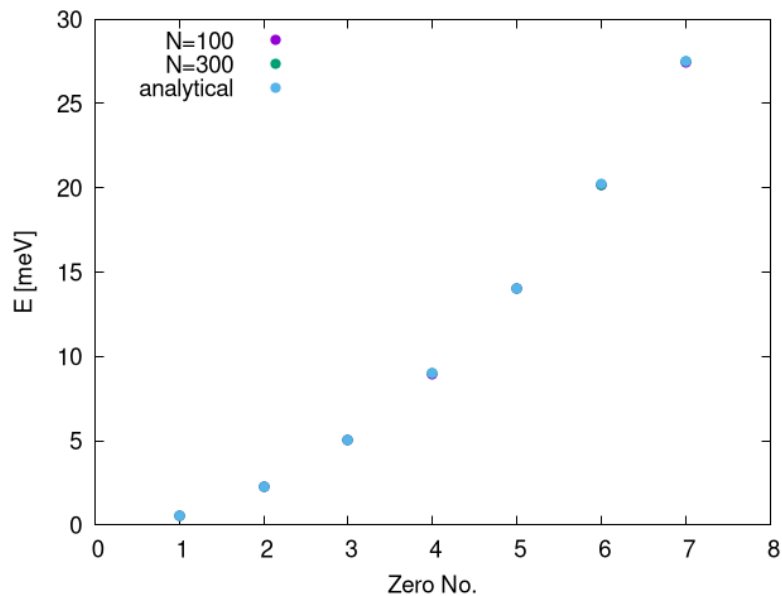
Rysunek 1: Wartość funkcji falowej na końcu studni w zależności od energii. Funkcja falowa nie była normalizowana. Widać, że kolejne miejsca zerowe odpowiadające kolejnym stanom własnym są coraz dalej od siebie. W badanym zakresie energii istnieje siedem stanów własnych.

1.2 Okolice drugiego stanu wzbudzonego



Rysunek 2: Znormalizowana funkcja falowa dla drugiego stanu wzbudzonego oraz dla energii o 5% większej i mniejszej niż ten stan.

2 Znajdowanie stanów własnych metodą bisekcji



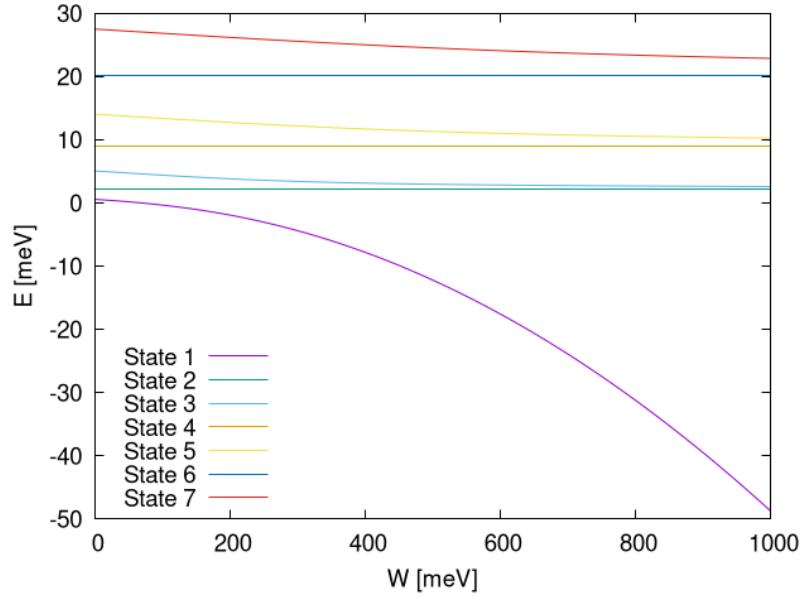
Rysunek 3: Znalezione miejsca zerowe funkcji falowej na końcu studni w zależności od energii. Widać, że wyniki numeryczne pokrywają się z analitycznymi.

n	$N = 100$	$N = 300$	analytical
1	0.561241	0.561282	0.561287
2	2.24441	2.24507	2.24515
3	5.04785	5.05117	5.05159
4	8.96879	8.97929	8.9806
5	14.0034	14.029	14.0322
6	20.1466	20.1997	20.2063
7	27.3924	27.4908	27.5031

Tabela 1: Zestawienie wyników numerycznych i analitycznych dla kolejnych stanów własnych. Dokładność wyników numerycznych zwiększa się wraz ze wzrostem N szczególnie dla wyższych stanów własnych.

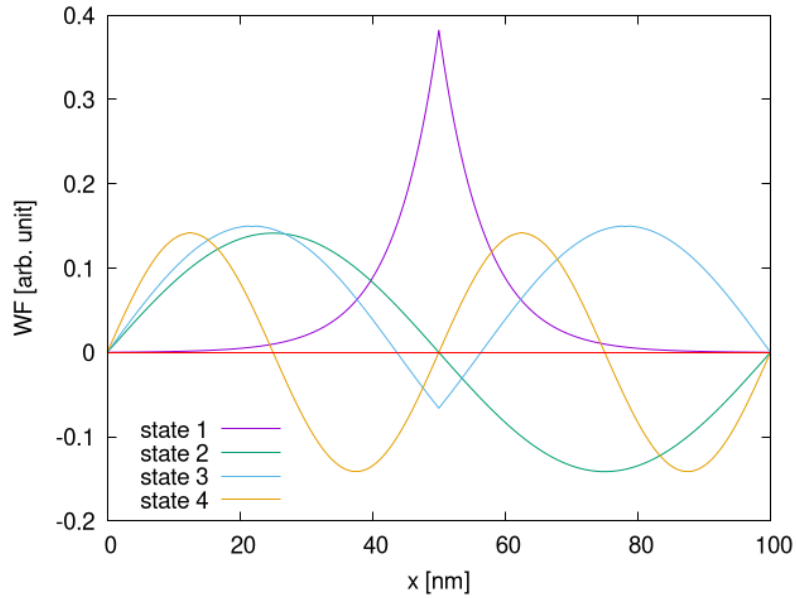
3 Bariera potencjału

3.1 Stany własne w funkcji głębokości bariery



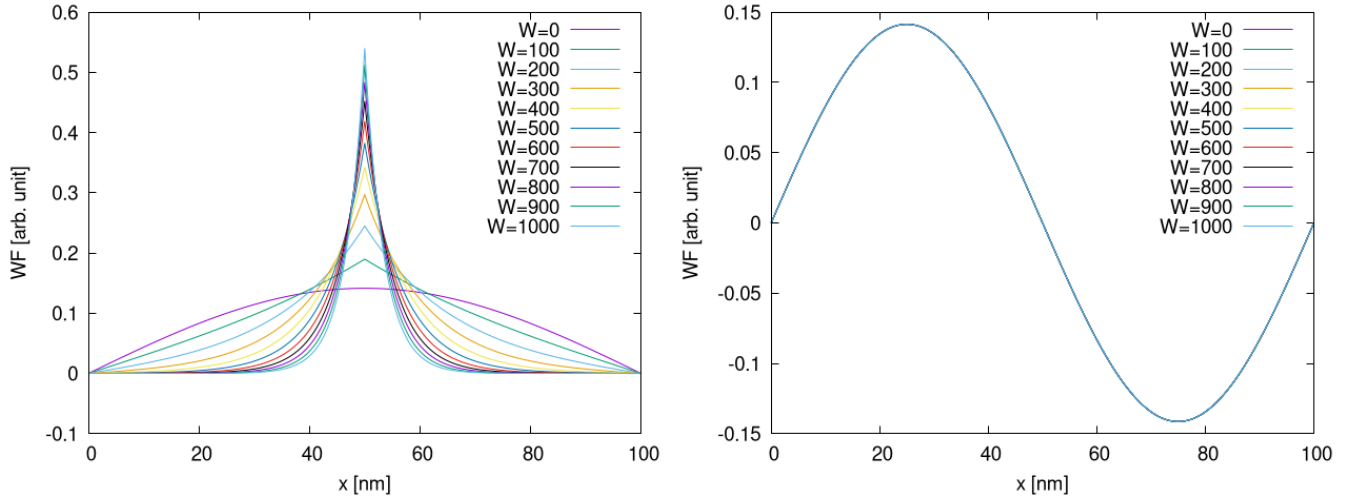
Rysunek 4: Energia stanów własnych w funkcji głębokości bariery. Energia najniższego stanu jest ujemna i dość szybko maleje, a pozostałe stany o nieparzystym indeksie zbiegają do stanów parzystych o indeksie o jeden mniejszym. Stany o parzystym indeksie nie wykazują zależności od głębokości bariery.

3.2 Funkcje falowe z barierą -500 meV



Rysunek 5: Funkcje falowe czterech najniższych stanów z barierą -500 meV. Stan podstawowy zlokalizowany jest w miejscu bariery. Stan o indeksie 3 w sporej mierze rozkłada się symetrycznie po bokach bariery. Stany o parzystym indeksie nie wykazują zależności od głębokości bariery.

3.3 Funkcje falowe najniższych stanów w zależności od bariery



Rysunek 6: Funkcje falowe w zależności od głębokości bariery. Najniższy stan (po lewej), pierwszy wzbudzony (po prawej). Widać, że wraz ze wzrostem głębokości bariery stan podstawowy lokalizuje się w miejscu bariery, a stan wzbudzony nie wykazuje od niej zależności.

Odpowiedzi na pytania

1. Gdzie zlokalizowany jest stan podstawowy? Wyjaśnić do jakich energii zbiegają wyniki dla wysokiego W .

- Stan podstawowy
Jest zlokalizowany w miejscu bariery. Dla wysokich wartości W energia stanu podstawowego szybko maleje, co pokazuje, że stan ten jest mocno związany. Jego funkcja falowa wraz z rosnącym W zaczyna przypominać deltę Diraca.
- Stany o parzystym i
Słabo albo i wcale nie zależą od W .
- Stany o nieparzystym i
Ich energia zbiega dla rosnącego W do stanów o parzystym indeksie $i - 1$. Funkcja falowa odbija się od silnie ujemnego potencjału i rozkłada się symetrycznie po bokach bariery. Stan o indeksie $i = 2k + 1$ dla $k > 0$ w pełnej studni generuje dwa stany o indeksie $i' = k$ w studniach o połowie długości po obu stronach bariery. Zgodnie ze wzorem analitycznym na energię stanu i :

$$E_{i'} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL'^2} i'^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m \left(\frac{L}{2}\right)^2} k^2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (2k)^2 = E_{i-1} \quad (1)$$

Stąd też obserwujemy, że energie stanów o indeksach nieparzystych zbiegają do stanów o indeksach parzystych o jeden mniejszych wraz z rosnącą głębokością bariery.

2. Dlaczego energie stanów o parzystym i słabo zależą od W ?

W miejscu ustawienia bariery tj. $N/2$ funkcja falowa o indeksie parzystym ma węzeł i jest równa zero (patrz rys. 5), a w zdyskretyzowanym równaniu Schrodingera (poniżej) wyrażenie zawierające potencjał jest mnożone przez wartość funkcji falowej w tym samym punkcie. Stąd też energia stanu o indeksie parzystym nie zależy od głębokości bariery.

$$\Psi_{i+1} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_i) \Delta x^2 \Psi_i - \Psi_{i-1} + 2\Psi_i \quad (2)$$