

Równanie Schrödingera zależne od czasu

5 listopada 2023

1

Elektron (masa $m = 0.067m_0$ jak poprzednio) uwięziony jest w potencjale oscylatora harmonicznego $V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Operator energii $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$. Energia oscylatora $\hbar\omega = 5$ meV.

Do rozwiązania problemu ewolucji funkcji falowej wewnątrz potencjału $i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = H\Psi(x,t)$, wykorzystamy metodą Askara $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t - dt) + \frac{2dt}{i\hbar} H\Psi(x, t)$. Drugą pochodną zastąpimy ilorazem różnicowym, jak poprzednio.

2

Pracujemy w pudle $x \in [-100, 100]$ nm, na 201 punktach. Na ostatnim i pierwszym trzymamy warunek brzegowy $\Psi(\pm 100\text{nm}, t) = 0$. Interesuje nas przedział czasowy $t \in [0, 5T]$, gdzie $T = \frac{2\pi}{\omega}$. Liczymy z krokiem czasowym $dt = 1$ [w jednostkach atomowych]. Jednostka atomowa czasu: 2.42×10^{-5} ps.

Wstawiamy jako warunek początkowy funkcję $\Psi(x, t = 0) = C \exp(-m\omega x^2/2) e^{ikx}$, gdzie $k = m\omega x_0$. Funkcję proszę unormować (wyznaczyć C) jak na zajęciach z iteracji w czasie urojonym. Dla $\Psi(x, t = dt)$ przyjmujemy $\Psi(x, t = dt) = \Psi(x, t = 0) \times \exp(-i\frac{\omega dt}{2})$ (to nie jest dokładny wynik).

3

Przyjąć $x_0 = 30$ nm. Narysować $|\Psi(x, t)|^2$. Uwaga: wyprowadzać np. co 500 albo co 1000 krok czasowy. (40 pkt)

4

Policzyć wartość oczekiwaną położenia $\langle x \rangle(t)$ porównać z wynikiem klasycznym dla położenia cząstki punktowej $x(t) = x_0 \sin(\omega t)$ (dla przyjętej funkcji falowej przy $t = 0$ średnie położenie elektronu wynosi 0). (30 pkt)

5

Zmienić warunek początkowy na $x_0 = 0$. Jak zmienia się w czasie gęstość prawdopodobieństwa (20 pkt) ?

6

Zostawiamy potencjał oscylatora jak wyżej. Ustawiamy jako stan początkowy stan podstawowy nieskończonej studni potencjału: $\cos(\pi x/L)$ i normujemy go ($L = 200$ nm). Jak zmienia się w czasie gęstość prawdopodobieństwa (10 pkt) ?

Uwaga, jeśli schemat Askara jest napisany poprawnie, nie trzeba normować funkcji falowej w każdym kroku czasowym.