

## Dynamika kwantowa naładowanej cząstki w pudle w zmiennym polu elektrycznym.

Ćwiczenie polega na symulacji zachowania cząstki kwantowej przez numeryczne rozwiązanie zależnego od czasu równania Schroedingera. W tym celu należy uruchomić prosty program komputerowy realizujący podany algorytm i tworzący dane wynikowe, które mogą być wizualizowane za pomocą dostępnych programów graficznych.

### Model

W proponowanym przykładzie rozważamy elektron zamknięty w jednowymiarowym pudle i poddany działaniu jednorodnego pola elektrycznego o amplitudzie oscylującej w czasie. Wszelkie efekty relatywistyczne, a w szczególności spin elektronu zostaną zaniedbane. W trakcie symulacji będziemy obserwować ewolucję funkcji falowej elektronu oraz pochłanianie lub oddawanie energii przez elektron wynikające z oddziaływania z zewnętrznym polem. Opis ten może stanowić uproszczony model dla elektronu związanego w atomie lub jonu w pułapce magnetycznej oddziałujących z promieniowaniem elektromagnetycznym.

Rozważmy cząstkę o masie  $m$  ładunku  $e$  zamkniętą w jednowymiarowym pudle o długości  $L$ . Położenie cząstki mierzymy współrzędną  $X \in (0; L)$ . Pudło umieszczamy w jednorodnym polu elektrycznym o kierunku  $X$  i zależnej od czasu amplitudzie  $K(t) = K_o \sin \Omega t$ . Energię potencjalną dla ruchu cząstki możemy przedstawić w postaci:

$$V(X, t) = \begin{cases} K_o e (X - L/2) \sin \Omega t & \text{dla } X \in (0; L) \\ +\infty & \text{dla } X \notin (0; L) \end{cases} \quad (1)$$

W nierelatywistycznej teorii kwantowej maksymalna dostępna informacja o stanie cząstki w dowolnej chwili czasu zawarta jest w funkcji falowej  $\Psi(X, t)$  o wartościach zespolonych. Funkcja ta spełnia zależne od czasu równanie Schroedingera:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(X, t)}{\partial t} = \hat{H}(X, t) \Psi(X, t) \quad (2)$$

Prawa strona powyższego równania zawiera operator Hamiltona, który w naszym wypadku składa się z operatora energii kinetycznej dla ruchu na kierunku  $X$  oraz potencjału danego wzorem (1):

$$\hat{H}(X, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + V(X, t) \quad (3)$$

Równanie (2) obowiązuje dla  $X \in (0; L)$  wraz z podanymi poniżej warunkami brzegowymi wynikającymi z nieskończonej wysokości ścian potencjału ograniczających pudło:

$$\Psi(0, t) \equiv \Psi(L, t) \equiv 0 \quad (4)$$

Rozwiązanie równania (2) wraz z warunkami brzegowymi (4), czyli wyznaczenie ewolucji funkcji falowej  $\Psi(X, t)$  w pewnym okresie czasu, przeprowadzić można numerycznie zakładając dowolną (ale spełniającą warunki brzegowe) postać funkcji w chwili początkowej  $t_o$ :

$$\Psi(X, t_o) = \Psi_o(X) \quad (5)$$

Znajomość  $\Psi(X, t)$  pozwala wyznaczyć mierzalne wielkości fizyczne charakteryzujące cząstkę. W tym wypadku wygodnie jest mieć funkcję spełniającą warunek normalizacyjny:

$$\int_0^L \Psi(X, t)^* \Psi(X, t) dX = 1 \quad (6)$$

Teoretycznie wystarczy, aby warunek ten spełniony był przez funkcję początkową  $\Psi(X, t_o)$ , gdyż równanie Schrodingera nie zmienia normy funkcji falowej (w symulacji mogą pojawić się zmiany normy wynikające z przybliżonego charakteru metod numerycznych). Z unormowanej funkcji falowej będziemy obliczać rozkład gęstości prawdopodobieństwa dla położenia cząstki, wartość średnią położenia oraz wartość średnią całkowitej energii cząstki:

$$\rho(X, t) = \Psi(X, t)^* \Psi(X, t) \quad (7)$$

$$\langle X \rangle(t) = \int_0^L \Psi(X, t)^* X \Psi(X, t) dX \quad (8)$$

$$\langle E \rangle(t) = \int_0^L \Psi(X, t)^* \hat{H}(X, t) \Psi(X, t) dX \quad (9)$$

## Przewidywania teoretyczne

Przy wyłączonym polu elektrycznym ( $K_o = 0$ ) mamy do czynienia z cząstką poruszającą się swobodnie w ograniczonym obszarze pudła. W przypadku tym równanie (2) z warunkami (4) oraz (5) rozwiązać można analitycznie, o ile tylko pozwala na to wystarczająco nieskomplikowana postać funkcji początkowej  $\Psi_o(X)$ . Pewna klasa takich rozwiązań nosi nazwę stanów stacjonarnych, które dla odróżnienia od dowolnych rozwiązań  $\Psi(X, t)$  będziemy oznaczać symbolem  $\Phi(X, t)$ . Dla pudła o nieskończenie wysokich ścianach potencjału (i dowolnym, ale niezależnym od czasu potencjale wewnątrz) istnieje nieskończenie wiele stanów stacjonarnych, numerowanych indeksem  $n = 1, 2, \dots$ . Stany te mają następującą ogólną postać:

$$\Phi_n(X, t) = \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \phi_n(X) \quad (10)$$

Analityczną postać funkcji  $\phi_n(X)$  oraz wartość parametru  $E_n$  uzyskać można podstawiając  $\Phi_n(X, t)$  do równania (2) z wyłączonym polem elektrycznym ( $K_o = 0$ ) oraz spełniając warunki brzegowe (4). W efekcie uzyskujemy (dla  $n = 1, 2, \dots$ ):

$$\phi_n(X) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi X}{L}\right) \quad (11)$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \quad (12)$$

Stały czynnik występujący we wzorze (11) przed funkcją sinus zapewnia automatyczne unormowanie stanów  $\Phi_n(X, t)$ . Stany stacjonarne odróżniają się od innych stanów dwiema

podstawowymi cechami: rozkład gęstości prawdopodobieństwa obliczany ze wzoru (7) nie zależy od czasu, a energia cząstki w stanie stacjonarnym posiada ściśle zdefiniowaną wartość wynoszącą  $E_n$  (można to pokazać obliczając wartość średnią energii,  $\langle \hat{H} \rangle = E_n$ , oraz dyspersję,  $\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2 = 0$ ). Dowolna liniowa kombinacja stanów stacjonarnych jest także rozwiązaniem równania (2), co można sprawdzić przez podstawienie (cały czas rozważamy przypadek  $K_o = 0$ ). Ponadto można udowodnić, że każde rozwiązanie równania (2) spełniające warunki brzegowe (4) da się przedstawić jako liniowa kombinacja w ogólności nieskończonej liczby stanów stacjonarnych (10):

$$\Psi(X, t) = \sum_n c_n \Phi_n(X, t) \quad (13)$$

gdzie  $c_n$  są pewnymi liczbami zespolonymi o wartościach zależnych od konkretnej postaci funkcji  $\Psi(X, t)$ . Stan (13) nie jest już jednak stacjonarny, jeśli więcej niż jeden współczynnik  $c_n$  jest różny od zera. Weźmy na przykład kombinację dwu stanów, w której dla uproszczenia współczynniki  $c_n$  i  $c_m$  są rzeczywiste:

$$\Psi(X, t) = c_n \Phi_n(X, t) + c_m \Phi_m(X, t) \quad (14)$$

Obliczenie gęstość prawdopodobieństwa ze wzoru (7) daje w tym przypadku:

$$\begin{aligned} \rho(X, t) &= c_n^2 \phi_n(X)^2 + c_m^2 \phi_m(X)^2 \\ &+ 2\phi_n(X)\phi_m(X) \cos \left[ \frac{(E_n - E_m)t}{\hbar} \right] \end{aligned} \quad (15)$$

Jak widać rozkład prawdopodobieństwa zawiera składnik oscylujący w czasie. Jeśli przy tym liczby  $n$  i  $m$  mają przeciwną parzystość to prawdopodobieństwa znalezienia cząstki po jednej lub drugiej stronie pudła oscylują z przeciwną fazą (co łatwo sprawdzić na przykładzie  $n = 1, m = 2$ ). Ponieważ nasza cząstka jest naładowana, to zachowuje się jak drgający dipol elektryczny. W przypadku, gdy potencjał wewnątrz studni zależy od czasu (czyli w naszym przykładzie  $K_o \neq 0, \Omega \neq 0$ ), funkcje zadane wzorami (10,11) pojedynczo nie mogą spełnić równania Schroedingera, co więcej, w ogóle nie istnieją wtedy stany stacjonarne. Okazuje się jednak, że każdą funkcję  $\Psi(X, t)$ , która spełnia równanie Schroedingera można nadal przedstawić w postaci liniowej kombinacji (13), jeśli dopuścimy, aby wartości współczynników  $c_n$  zależały od czasu. Rozważmy teraz sytuację, gdy za funkcję w chwili początkowej wybierzemy jeden ze stanów (10), tzn.  $\Psi(X, t_o) = \Phi_n(X, t_o)$ , i obserwujemy dynamikę z włączonym potencjałem oscylującym. W dowolnej późniejszej chwili czasu ewoluującą funkcję falową  $\Psi(X, t)$  możemy rozwinąć w szereg (13) stwierdzając, że stopniowo pojawiają się w nim niezerowe składniki odpowiadające różnym funkcjom  $\Phi_m(X, t)$ . Oznacza to, że w rozkładzie gęstości prawdopodobieństwa cząstki,  $\rho(X, t)$ , pojawiają się wyrazy oscylujące w czasie, tak jak zostało to pokazane w przykładzie (15). Jeśli częstości drgań naładowanej cząstki będą odpowiadały częstości drgań pola elektrycznego,  $\Omega = |E_n - E_m|/\hbar$  możemy spodziewać się efektu rezonansowego: cząstka będzie szczególnie gwałtownie pochłaniać lub oddawać energię. Zjawisko to będziemy się starali zaobserwować w symulacji.

## Zmienne bezwymiarowe

Przed matematycznym sformułowaniem algorytmu służącego do rozwiązywania równania Schroedingera wygodnie jest przejść do zmiennych bezwymiarowych dla położenia i czasu:

$$\begin{cases} x = X/L \\ \tau = t\hbar/(mL^2) \end{cases} \quad (16)$$

Po podstawieniu nowych zmiennych do równania (2) oraz wyrażenia na Hamiltonian (3) dostajemy:

$$i \frac{\partial \Psi(x, \tau)}{\partial \tau} = \hat{H}(x, \tau) \Psi(x, \tau) \quad (17)$$

$$\hat{H}(x, \tau) = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \kappa(x - 1/2) \sin \omega \tau \quad (18)$$

gdzie dodatkowo oznaczyliśmy:

$$\begin{cases} \kappa = K_o e m L^3 / \hbar^2 \\ \omega = \Omega m L^2 / \hbar \end{cases} \quad (19)$$

Równanie (17) obowiązuje dla  $x \in (0; 1)$ , a warunki brzegowe (4) przyjmują teraz postać:

$$\Psi(0, \tau) = \Psi(1, \tau) = 0 \quad (20)$$

Jeśli założymy dodatkowo, że funkcja falowa  $\Psi(x, \tau)$  ma wartości bezwymiarowe, wówczas warunek normalizacyjny (6) oraz wzory na gęstość rozkładu prawdopodobieństwa (7) i średnie położenie cząstki (8) mają postać:

$$\int_0^1 \Psi(x, \tau)^* \Psi(x, \tau) dx = 1 \quad (21)$$

$$\rho(x, \tau) = \Psi(x, \tau)^* \Psi(x, \tau) \quad (22)$$

$$\langle x \rangle(\tau) = \int_0^1 \Psi(x, \tau)^* x \Psi(x, \tau) dx \quad (23)$$

Za jednostkę energii wygodnie jest przyjąć wyrażenie  $\hbar^2/(mL^2)$ . Bezwymiarowe funkcje stanów stacjonarnych (10) oraz odpowiadające im wartości energii (12) wyrażone w nowych jednostkach są następujące:

$$\Phi_n(x, \tau) = \exp(-i\mathcal{E}_n \tau) \sqrt{2} \sin(n\pi x) \quad (24)$$

$$\mathcal{E}_n = n^2 \pi^2 / 2 \quad (25)$$

Wartość średnią energii dowolnej funkcji falowej spełniającej równanie (17) może być teraz obliczona w nowych jednostkach jako:

$$\langle \mathcal{E} \rangle(\tau) = \int_0^1 \Psi(x, \tau)^* \hat{H}(x, \tau) \Psi(x, \tau) dx \quad (26)$$

# Algorytm numeryczny

Funckję falową  $\Psi(x, \tau)$  reprezentować będziemy przez wartości w  $(N + 1)$  punktach  $x_k$  rozmieszczonych regularnie na odcinku  $[0; 1]$ :

$$x_k = k\Delta x, \quad \Delta x = 1/N, \quad k = 0, \dots, N \quad (27)$$

Wartości te mogą być przechowywane w rzeczywistych tablicach jednowymiarowych  $\Psi^R$  i  $\Psi^I$  odpowiadających części rzeczywistej i urojonej funkcji falowej:

$$\Psi(x_k, \tau) = \Psi_k^R + i\Psi_k^I \quad (28)$$

Tablice te zostają zainicjalizowana wartościami funkcji w chwili początkowej. W naszym wypadku będzie to jeden ze stanów stacjonarnych (24):

$$\Psi_k^R = \sqrt{2} \sin(n\pi x_k), \quad \Psi_k^I = 0, \quad k = 0, \dots, N \quad (29)$$

Działanie operatora Hamiltona na funckję  $\Psi(x, \tau)$  przybliżać będziemy operatorem różnicowym i zapisywać w pomocniczych tablicach  $H^R$  i  $H^I$ :

$$H_k^R = \hat{H}\Psi^R(x_k) = -\frac{1}{2} \frac{\Psi_{k+1}^R + \Psi_{k-1}^R - 2\Psi_k^R}{\Delta x^2} + \kappa(x_k - 1/2)\Psi_k^R \sin \omega \tau \quad (30)$$

Analogiczny wzór stosujemy dla obliczenia  $H^I$  z  $\Psi^I$ . Wzory te stosujemy dla  $k = 1, \dots, N - 1$ , natomiast dla punktów brzegowych kładziemy:

$$H_0^R = H_N^R = H_0^I = H_N^I \equiv 0 \quad (31)$$

Całkowanie równania Schroedingera w czasie, czyli wyznaczanie ewolucji funkcji falowej, dokonywać będziemy metodą drugiego rzędu z krokiem  $\Delta\tau$  zastosowaną do układu równań rzeczywistych wynikających z równania zespolonego (17):

$$\frac{d\Psi_k^R(\tau)}{d\tau} = H_k^I(\tau), \quad \frac{d\Psi_k^I(\tau)}{d\tau} = -H_k^R(\tau).$$

W każdym kroku całkowania obliczamy:

$$\Psi_k^R(\tau + \frac{\Delta\tau}{2}) = \Psi_k^R(\tau) + H_k^I(\tau)\Delta\tau/2 \quad (32)$$

$$\Psi_k^I(\tau + \Delta\tau) = \Psi_k^I(\tau) - H_k^R(\tau + \frac{\Delta\tau}{2})\Delta\tau \quad (33)$$

$$\Psi_k^R(\tau + \Delta\tau) = \Psi_k^R(\tau + \frac{\Delta\tau}{2}) + H_k^I(\tau + \Delta\tau)\Delta\tau/2 \quad (34)$$

W trakcie symulacji, co pewien krok czasowy, obliczać będziemy także dane pomocnicze o cząstce, które (wraz z aktualną wartością czasu) zapisywane będą wierszami na zbiór *\*.out*:

$$\begin{aligned} \mathcal{N} &= \Delta x \sum_k [(\Psi_k^R)^2 + (\Psi_k^I)^2] \\ x &= \Delta x \sum_k x_k [(\Psi_k^R)^2 + (\Psi_k^I)^2] \\ \mathcal{E} &= \Delta x \sum_k [\Psi_k^R H_k^R + \Psi_k^I H_k^I] \end{aligned}$$

Gęstość prawdopodobieństwa w wybranych krokach czasowych (jeśli nas interesuje) wygodnie zapisywać w osobnym zbiorze \*.dat w postaci wierszy (zbiór ten będzie można wykorzystać jako *field* w AVS):

$$\rho_k = (\Psi_k^R)^2 + (\Psi_k^I)^2, \quad k = 0, \dots, N$$

Na potrzeby wizualizacji wystarczy zapisywać rozrzedzone punkty (np dla  $N = 100$ , zapisujemy co drugi punkt, w sumie 51 punktów).

## Symulacje

W obliczeniach używać możemy następujących parametrów liczbowych (uwaga: parametry powinny być wczytywane ze zbioru inputowego, tu: dane orientacyjne):

Liczba przedziałów  $\Delta x$  on odcinku  $[0; 1]$ ,  $N = 100$

Krok całkowania po czasie,  $\Delta\tau < 0.001$ ? (wyznaczyć testując zachowanie energii) przy wyłączonym polu elektrycznym)

W pierwszych symulacjach należy sprawdzić poprawność algorytmu przy wyłączonym polu oscylującym ( $\kappa = 0$ ,  $\omega = 0$ ). Obliczenia wykonać można startując ze stanów początkowych (wzór 29) o numerach np.  $n = 1, 4, 9$ . Dla każdego przypadku wykonujemy po 4000 kroków symulacji i sprawdzamy zachowanie się normy, położenia średniego i energii.

W symulacjach z zaburzającym polem elektrycznym przyjąć należy wartość  $\kappa$  rzędu jedności (do kilku jednostek).

Symulacje przeprowadzić należy z różnymi wartościami częstości rezonansowej  $\omega = |\mathcal{E}_n - \mathcal{E}_m| = 3\pi^2/2, 4\pi^2/2, 8\pi^2/2 \dots$ . Czas symulacji należy dobrać tak, aby obejmowała co najmniej jeden pełny cykl okresowych zmian energii (co najmniej kilkanaście jednostek czasowych). Dane wynikowe we wszystkich rodzajach symulacji powinny być zapisywane z częstością dającą w sumie do kilkaset klatek czasowych. Na podstawie wykresów energii czastki w funkcji czasu należy określić, między którymi poziomami energetycznymi zachodzą przejścia rezonansowe, a między którymi nie.

Dla jednej wybranej częstości rezonansowej (np dla przejścia  $1 \rightarrow 2$ ) należy przeprowadzić badania okolicy rezonansu. W tym celu przeprowadzamy serię symulacji z wartością  $\omega$  równą 90, 92, 94, 98, 100, 102, 104, 106, 108 i 110 % wartości rezonansowej. Z każdej symulacji należy określić maksymalną wartość osiąganą przez energię czastki,  $\langle \mathcal{E} \rangle_{\max}$  a następnie wykonać wykres  $\langle \mathcal{E} \rangle_{\max}$  w funkcji  $\omega$ .