

Raport

Komputerowe metody symulacji ćwiczenie 2

1) Wstęp:

W ćwiczeniu należało zamodelować kwantowy elektron przy wykorzystaniu zależnego od czasu równania Schrödingera pobudzanego zewnętrznym polem potencjału:

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

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

Gdzie potencjał zmieniał się w zależności od czasu:

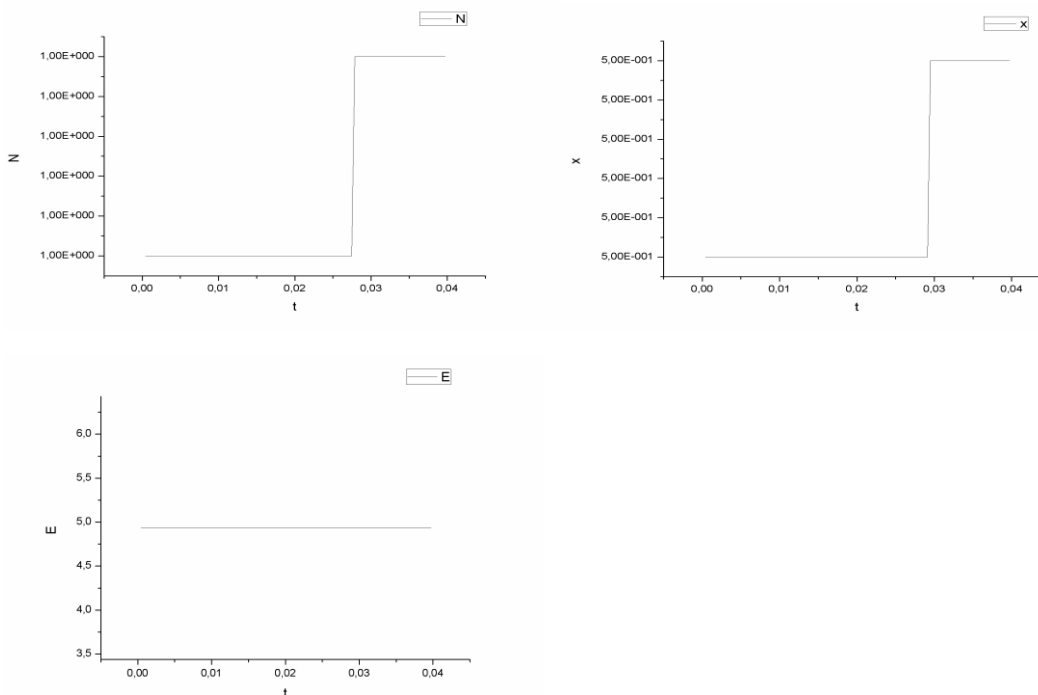
$$V(X,t) = \begin{cases} K_0 e^{(X-L/2) \sin \Omega t} & \text{dla } X \in (0; L) \\ +\infty & \text{dla } X \notin (0; L) \end{cases}$$

Wszystkie symulacje zostały przeprowadzone z krokiem $d\tau = 10^{-4}$ oraz ze 100 przedziałami w obszarze funkcji falowej.

2) Badanie stabilności:

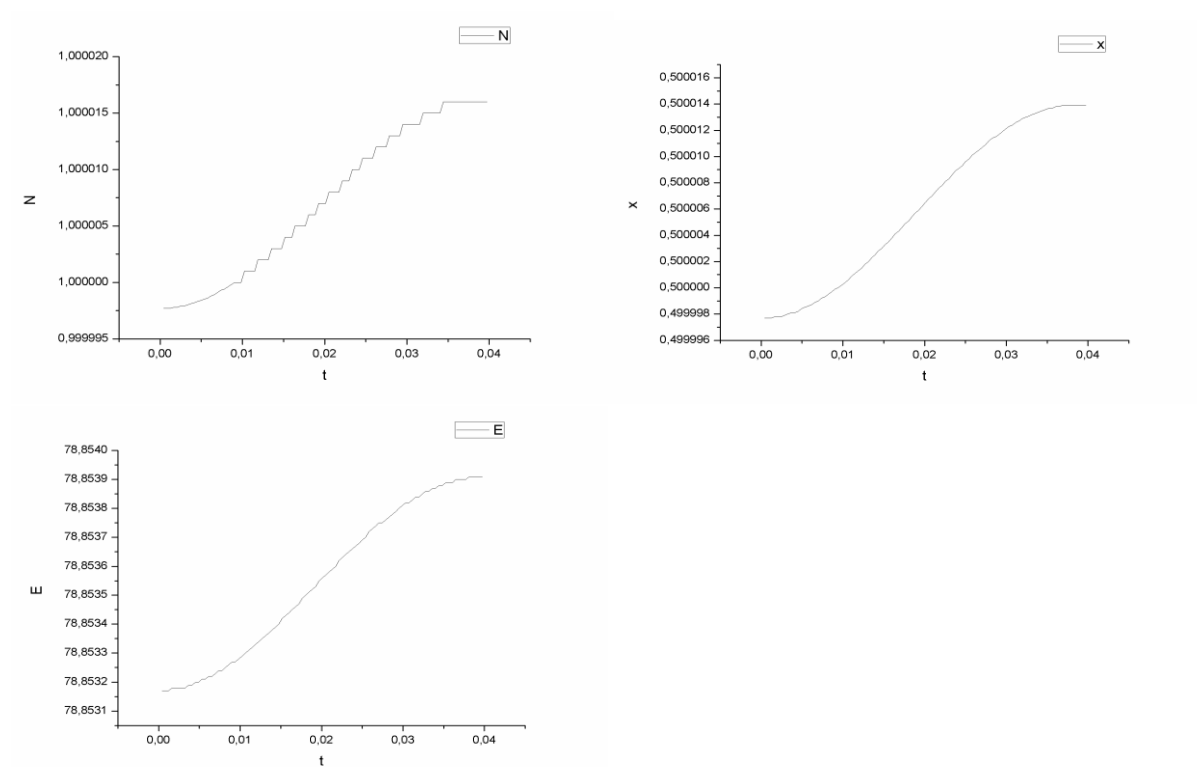
Należy przeprowadzić podstawowe symulacje z wyłączonym polem dla sprawdzenia stabilności programu przy zmieniającym się poziomie energetycznym od 1 do 9. Należało prześledzić zachowanie się normy, położenia średniego oraz energii:

Dla $n=1$:



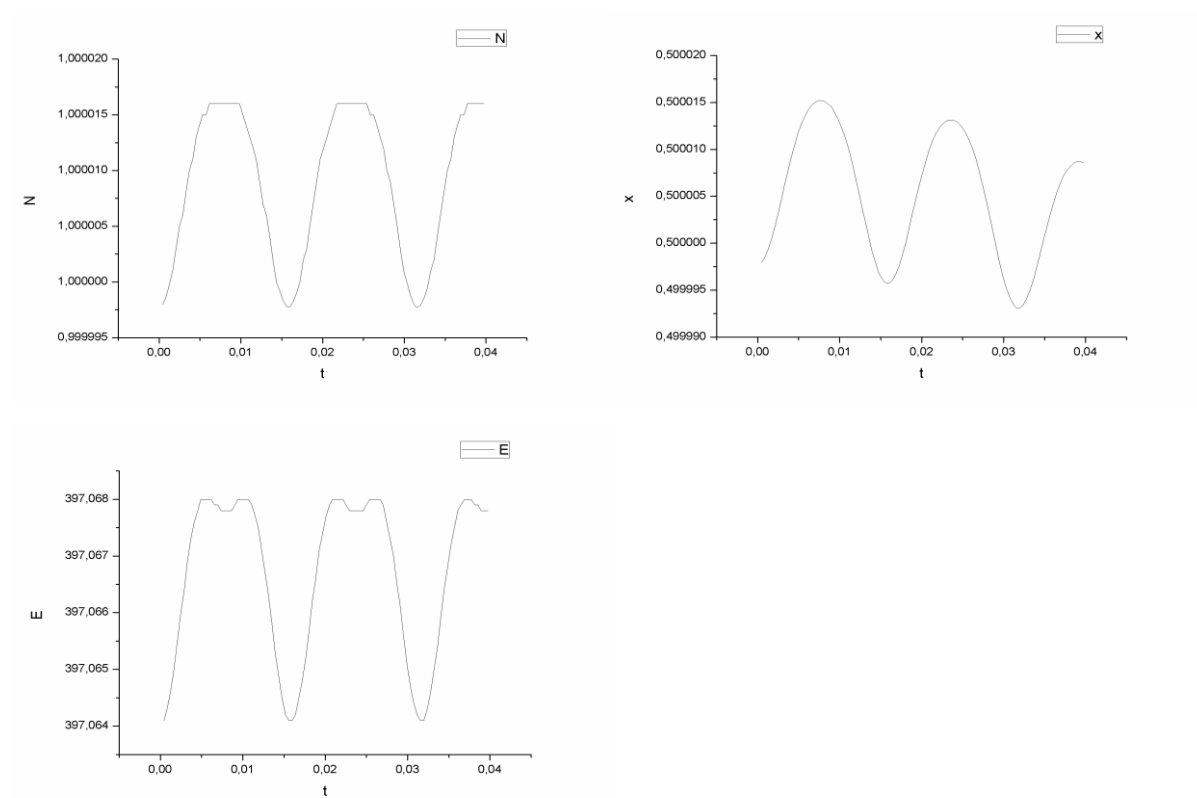
Wykresy dla poziomu energetycznego $n=1$.

Dla $n=4$:



Wykresy dla poziomu energetycznego $n=4$.

Dla $n=9$:



Wykresy dla poziomu energetycznego $n=9$.

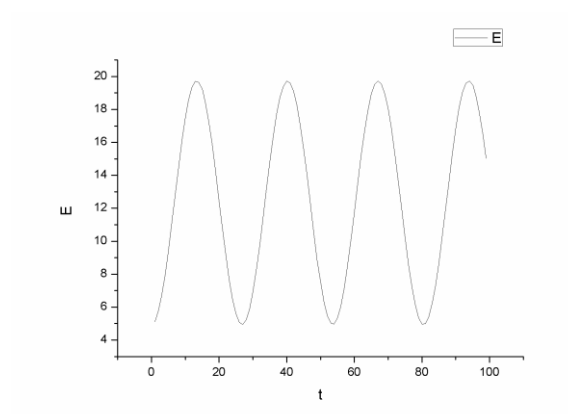
Jak widać na powyższych wykresach program zachowuje się stabilnie dla małych wartości poziomu energetycznego. Wraz ze wzrostem oscylacje ulegają nasileniu.

3) Przejścia rezonansowe:

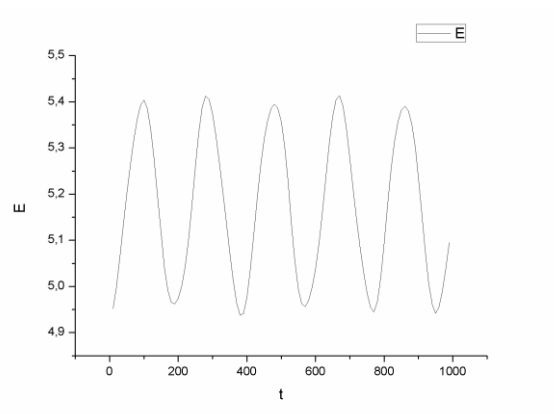
Należało zbadać poziomy energetyczne jak zachowują się pod wpływem częstości rezonansowej.

Dla $n=1$:

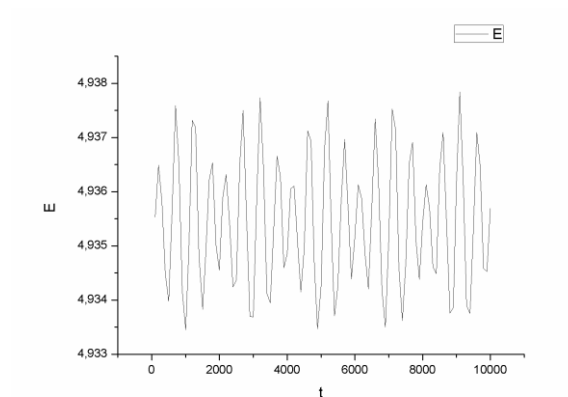
a)



b)



c)



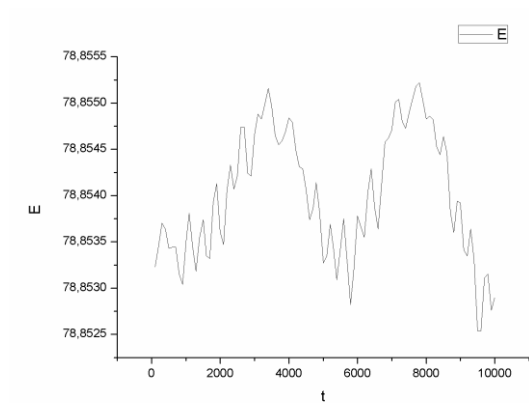
Energia dla różnej częstości rezonansowej dla początkowego poziomu energetycznego $n=1$.

a) $3\pi^2/2$ b) $4\pi^2/2$ c) $8\pi^2/2$

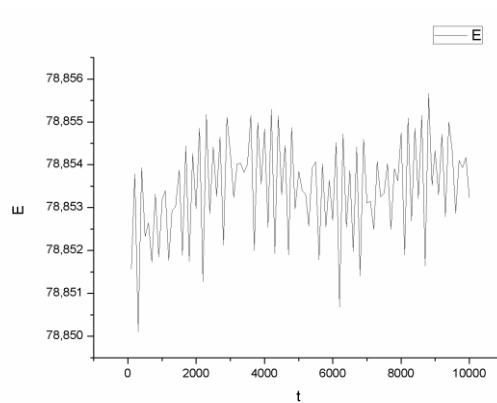
Jaki widać rezonans występuje jedynie w przypadku między 1 a 2 poziomem dla częstości a).

Dla $n=4$:

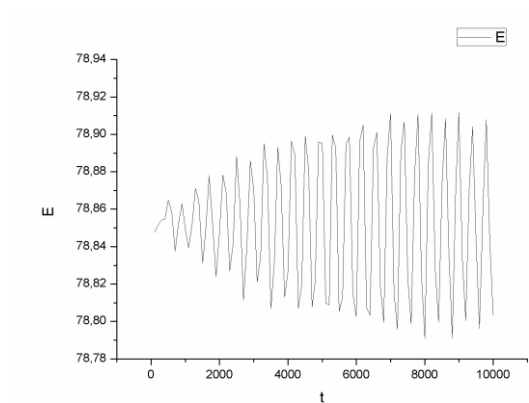
a)



b)



c)

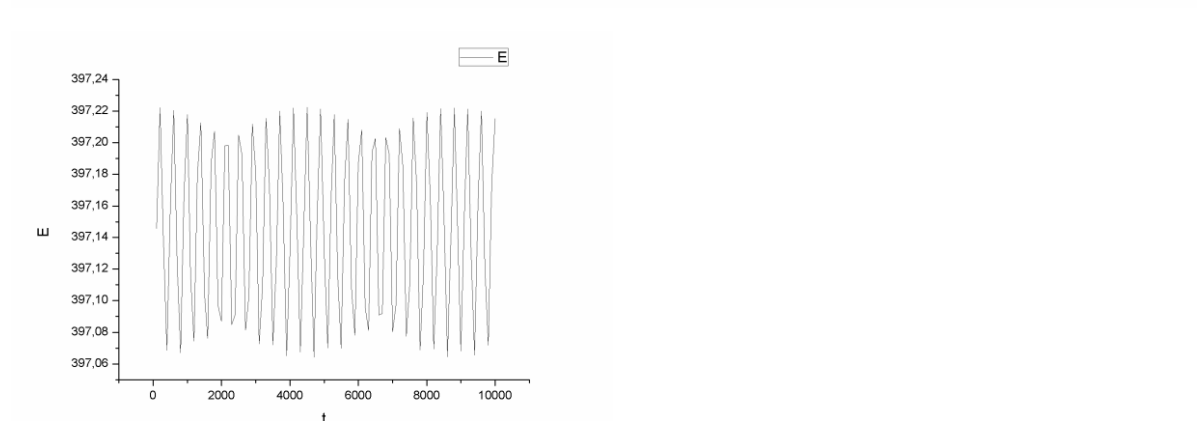
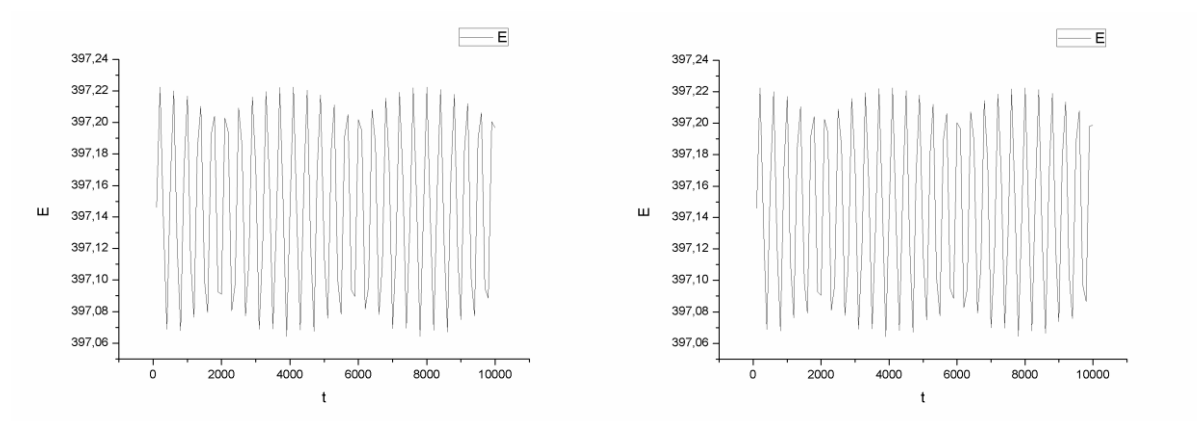


Energia dla różnej częstości rezonansowej dla początkowego poziomu energetycznego $n=4$.

$$\text{a) } 3\pi^2/2 \quad \text{b) } 4\pi^2/2 \quad \text{c) } 8\pi^2/2$$

Dla tego przypadku częstości rezonansowa nie miała miejsca dla żadnej częstości.

Dla $n=9$:



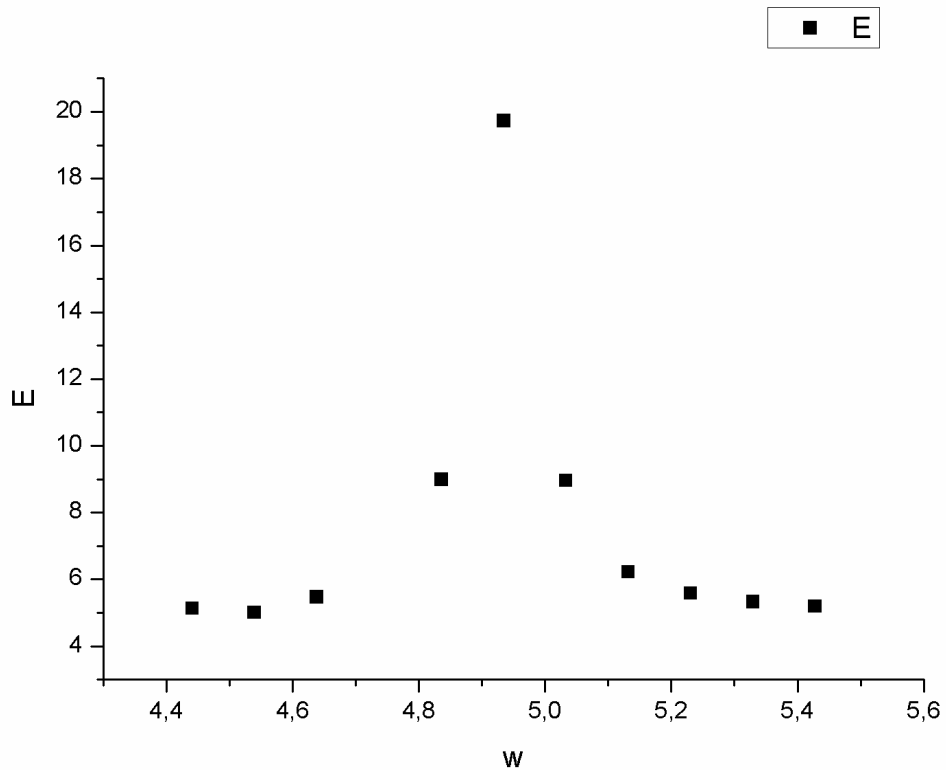
Energia dla różnej częstości rezonansowej dla początkowego poziomu energetycznego $n=9$.

a) $3\pi^2/2$ b) $4\pi^2/2$ c) $8\pi^2/2$

W tym przypadku również energia cząstki waha się w okolicach jednego poziomu energetycznego.

4) Badanie okolicy rezonansowej $1 \rightarrow 2$

Należy przeprowadzić badanie w funkcji częstości i określić maksymalną wartość częstości dla przejścia.



Energia cząstki w okolicach częstości $3\pi^2/2$. Maksimum przedstawia 100% wartości.

Jak widać na powyższym wykresie maksimum rezonansowe przypada na 100% wartości częstości. Sam kształt krzywej przypomina wykres teoretyczny o bardzo dużej dobroci.