

Dynamika kwantowa naładowanej cząstki w pudle w zmiennym polu elektrycznym

Mateusz Gałążyn

16 grudnia 2012

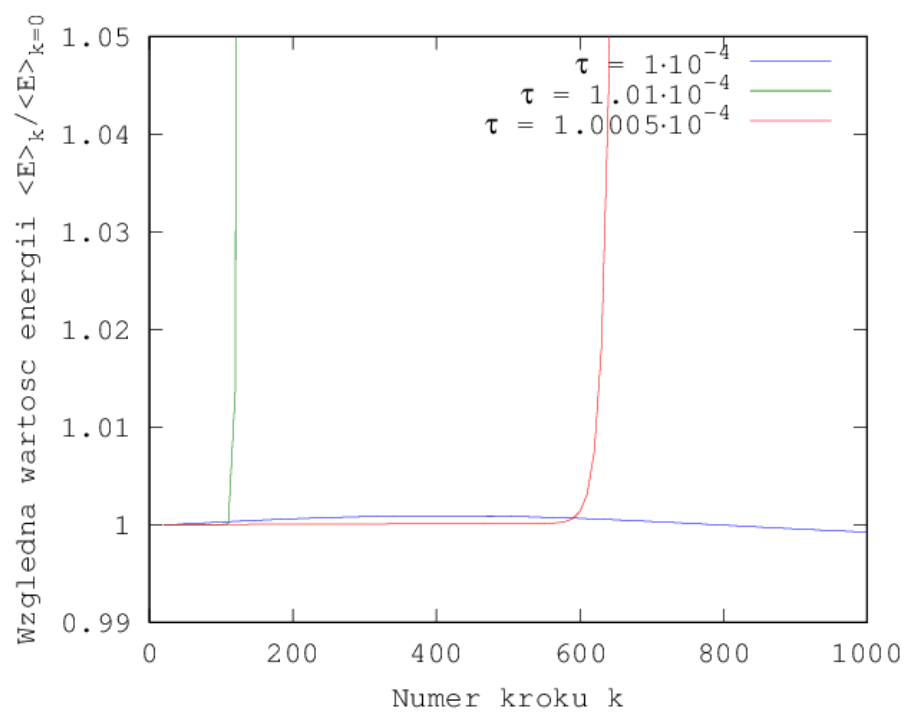
1 Wstęp

Celem projektu było wykonanie symulacji zachowania cząstki kwantowej przez numeryczne rozwiązywanie zależnego od czasu równania Shroedingera. W tym celu, algorytm podany w instrukcji ćwiczenia został zaimplementowany w języku C++. Dodatkowo została stworzony skrypt do generowania wykresów napisany w `Octave`.

2 Wyniki symulacji

2.1 Test programu

W celu znalezienia największego kroku czasowego, dla którego algorytm wykazywał stabilność (energia oraz norma nie wzrastała do nieskończoności), zostały wykonane testy dla różnych kroków czasowych: $\tau = 1 \cdot 10^{-4}, 1.01 \cdot 10^{-4}, 1.0005 \cdot 10^{-4}$. Wyniki testów zostały przedstawione na rys. 1. Algorytm zachowuje się stabilnie dla kroku czasowego mniejszego od $1 \cdot 10^{-4}$ - ta wartość została użyta w kolejnych symulacjach.



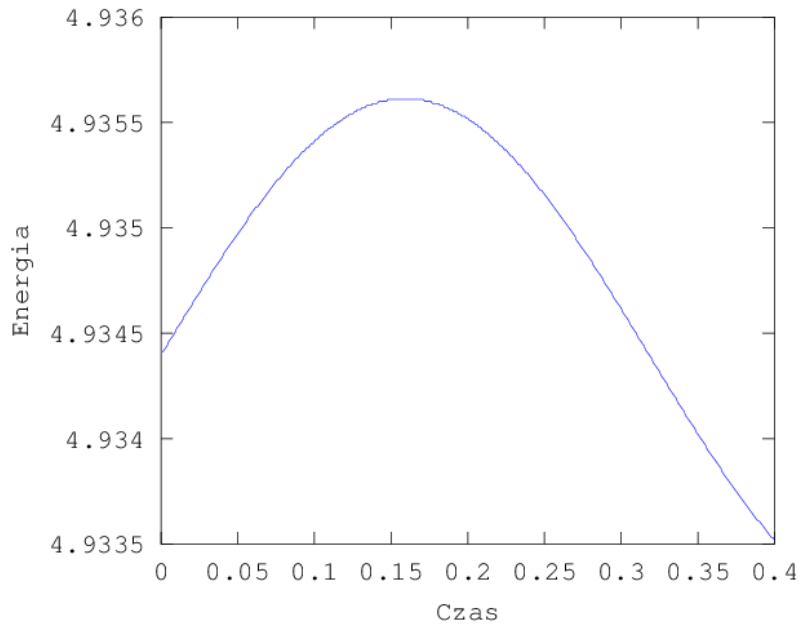
Rysunek 1: Względny przyrost energii w stosunku do energii początkowej dla trzech kroków czasowych. Algorytm wykazuje stabilność dla $\tau = 1 \cdot 10^{-4}$

2.2 Symulacja z wyłączonym polem

Dla wyłączonego pola została wykonana symulacja o długości 4000 kroków. Obszar, na którym obliczana była funkcja falowa został podzielony na 100 części. Zostały wykonane symulacje dla $n = 1, 2, 3, 4, 9$. Wartości energii maksymalnych dla poszczególnych stanów stacjonarnych:

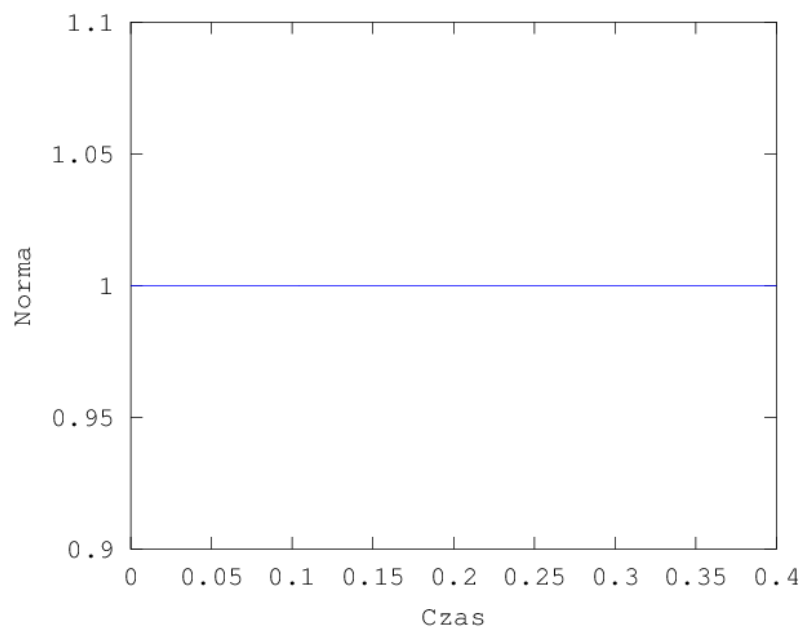
n	$\langle E \rangle_{max}$
1	4.93
2	19.75
3	44.48
4	79.16
9	404.87

Poniżej zostały przedstawione wybrane wykresy energii, normy funkcji falowej, rozkładu prawdopodobieństwa w studni potencjału oraz położenia cząstki w zależności od czasu trwania symulacji dla trzech stanów stacjonarnych.

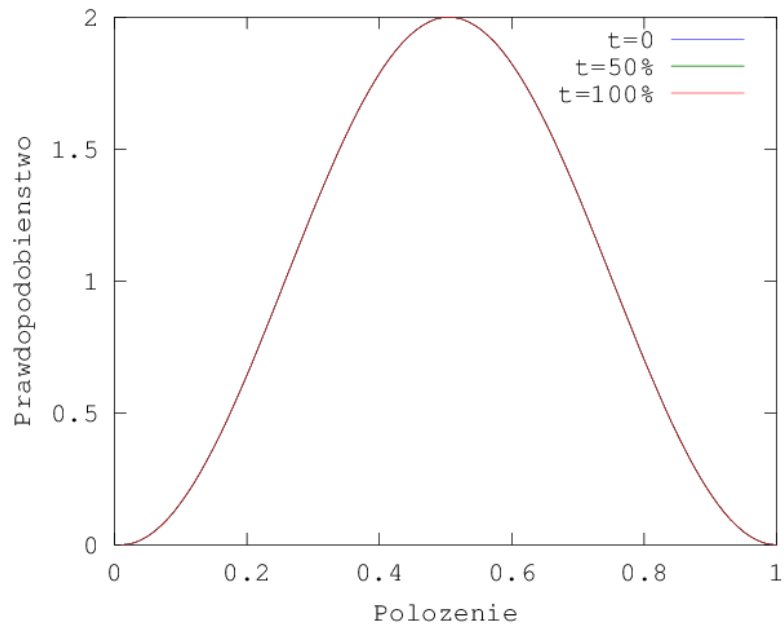


Rysunek 2: Wykres energii dla poziomu energetycznego $n = 1$

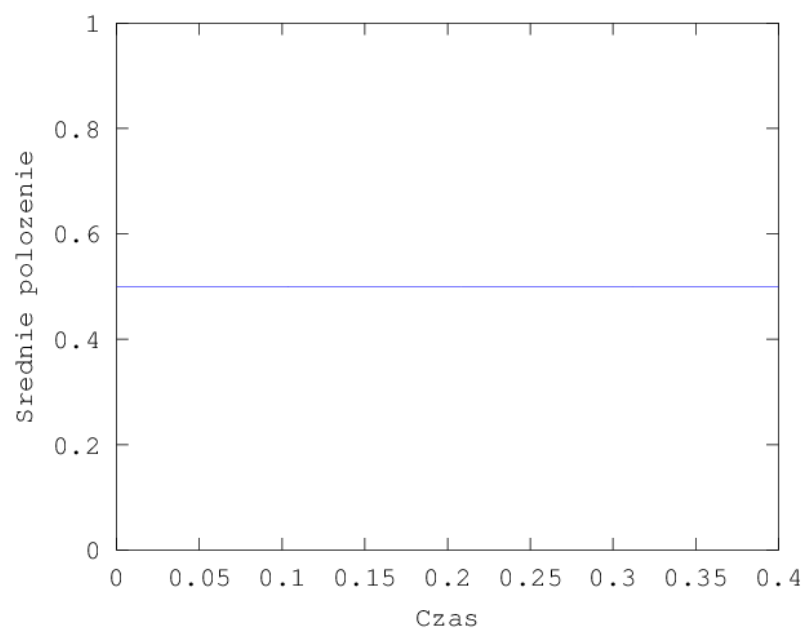
Dla każdej z symulacji norma funkcji falowej oraz jej kształt nie zmienia się w czasie. Średnie położenie jest równe $\langle x \rangle = 0.5$. Wartość energii wykazuje niewielkie oscylacje wokół ustalonej wartości.



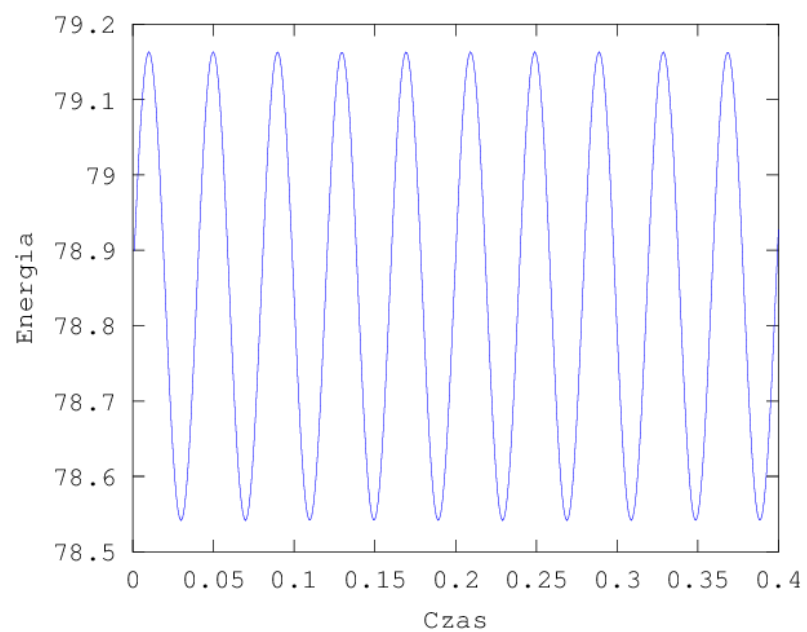
Rysunek 3: Wykres normy dla poziomu energetycznego $n = 1$



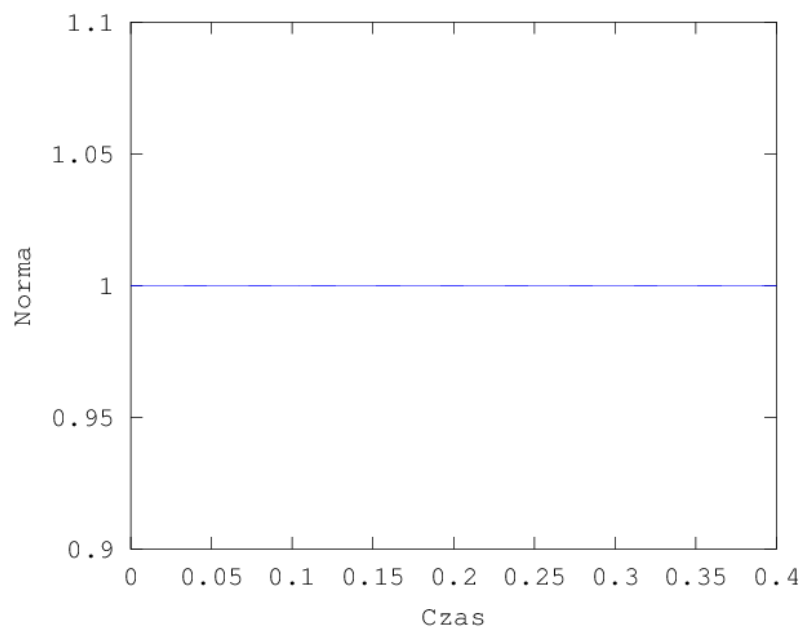
Rysunek 4: Wykres rozkładu prawdopodobieństwa na początku symulacji, w połowie symulacji oraz na końcu symulacji dla poziomu energetycznego $n = 1$



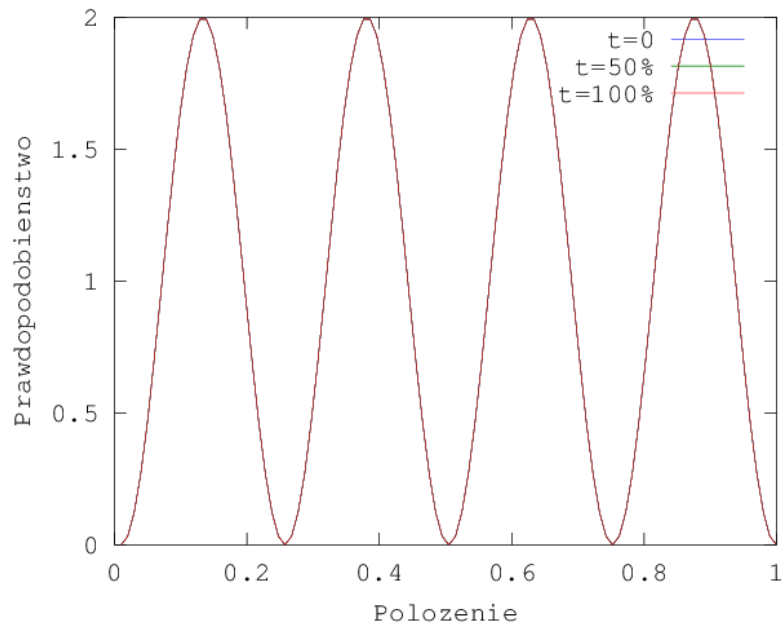
Rysunek 5: Wykres położenia cząstki dla poziomu energetycznego $n = 1$



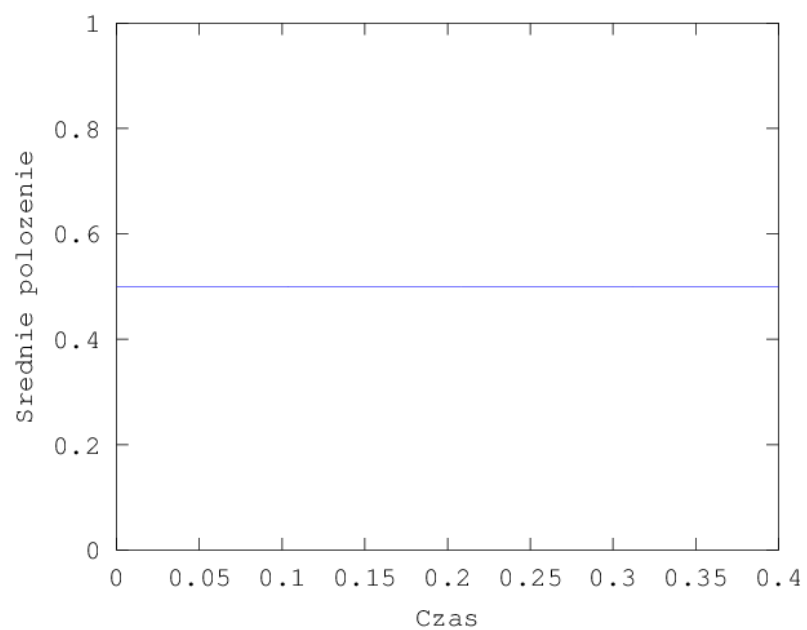
Rysunek 6: Wykres energii dla poziomu energetycznego $n = 4$



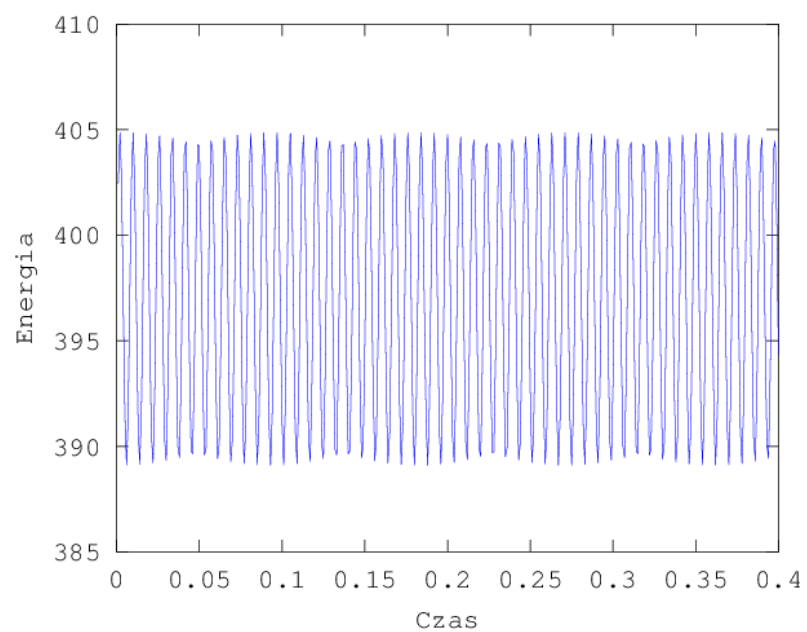
Rysunek 7: Wykres normy dla poziomu energetycznego $n = 4$



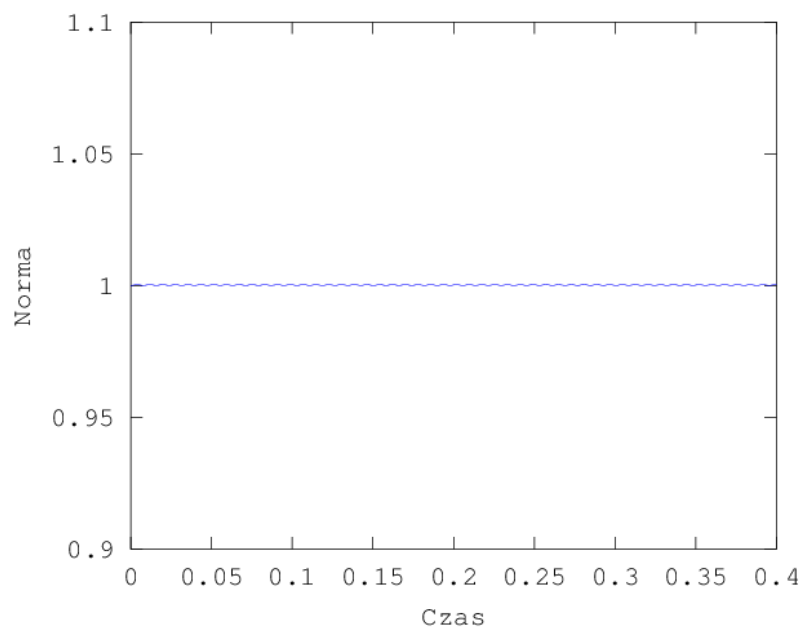
Rysunek 8: Wykres rozkładu prawdopodobieństwa na początku symulacji, w połowie symulacji oraz na końcu symulacji dla poziomu energetycznego $n = 4$



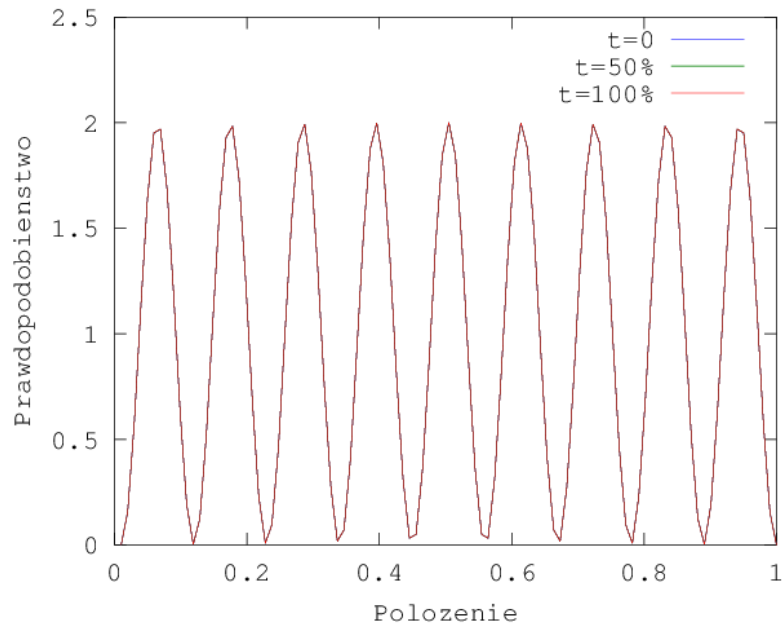
Rysunek 9: Wykres położenia cząstki dla poziomu energetycznego $n = 4$



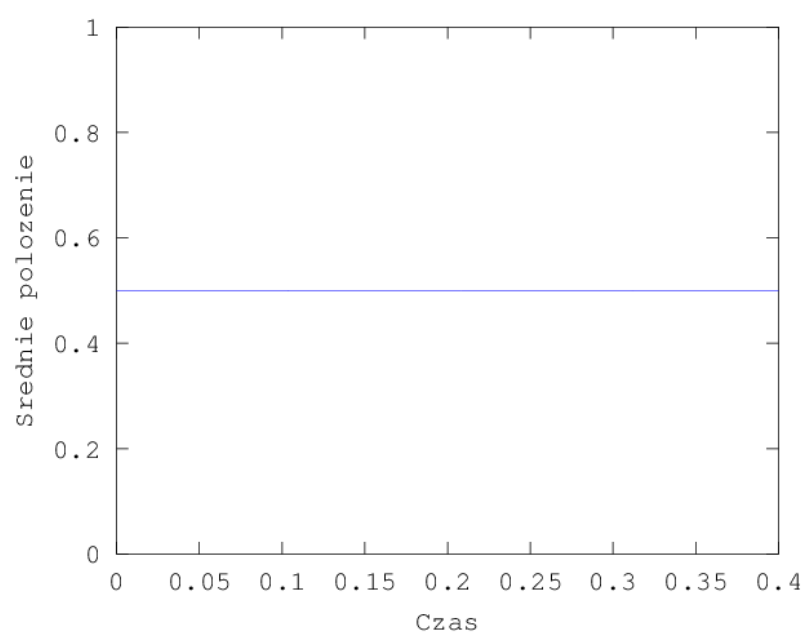
Rysunek 10: Wykres energii dla poziomu energetycznego $n = 9$



Rysunek 11: Wykres normy dla poziomu energetycznego $n = 9$



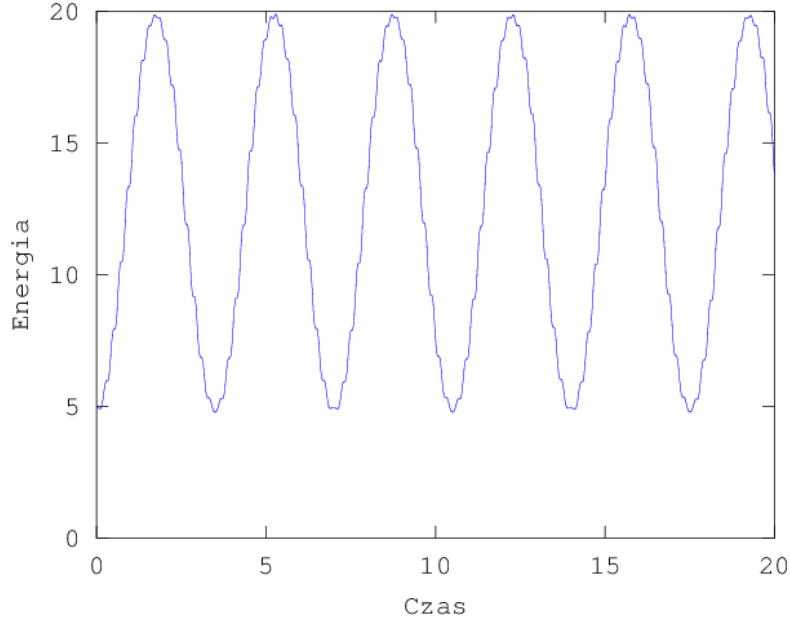
Rysunek 12: Wykres rozkładu prawdopodobieństwa na początku symulacji, w połowie symulacji oraz na końcu symulacji dla poziomu energetycznego $n = 9$



Rysunek 13: Wykres położenia cząstki dla poziomu energetycznego $n = 9$

2.3 Symulacja z włączonym polem

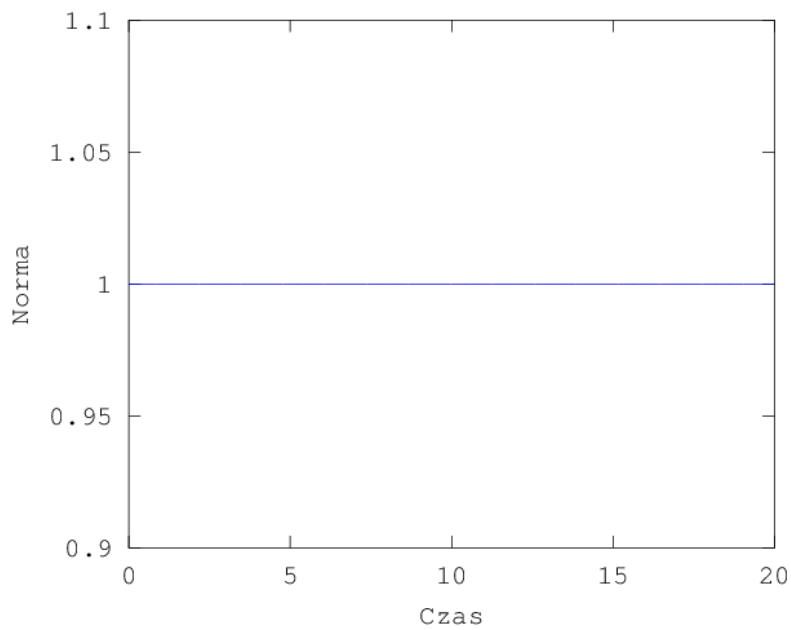
Zostały wykonane symulacje z włączonym polem dla poziomu energetycznego $n = 1$ oraz częstotliwościami rezonansowymi $\omega = 3\pi^2/2, 4\pi^2/2, 8\pi^2/2, 15\pi^2/2$. Parametr $\kappa = 5$, czas trwania symulacji wynosił 20 (200000 kroków). Poniżej zostały przedstawione wykresy energii, normy, gęstości prawdopodobieństwa i położenia:



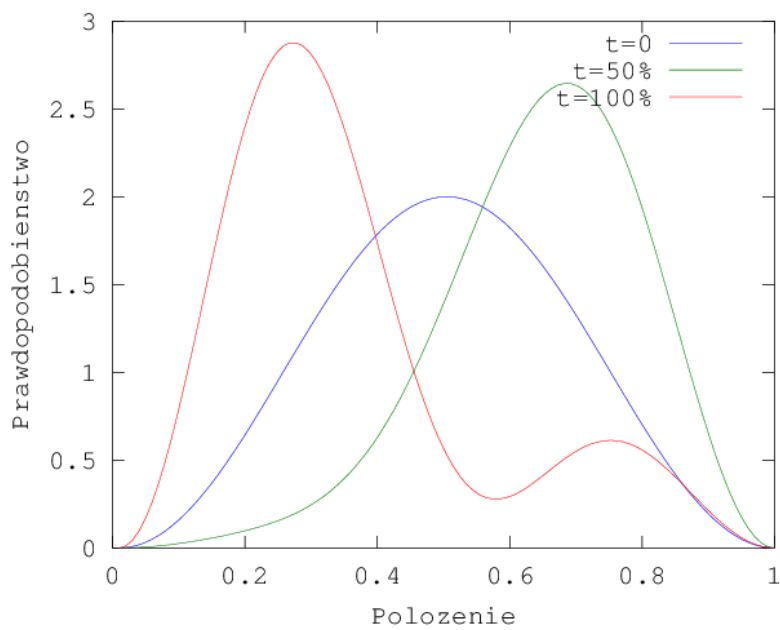
Rysunek 14: Wykres energii dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 3\pi^2/2$.

Przejście rezonansowe następuje gdy elektron przechodzi ze stanu podstawowego do jednego ze stanów wzbudzonych pod wpływem pola elektrycznego. Uwydatnia się to wahaniami energii oraz pojawieniem się wyższych stanów energetycznych na wykresie prawdopodobieństwa. Przejścia rezonansowe zostały zaobserwowane dla następujących poziomów energetycznych:

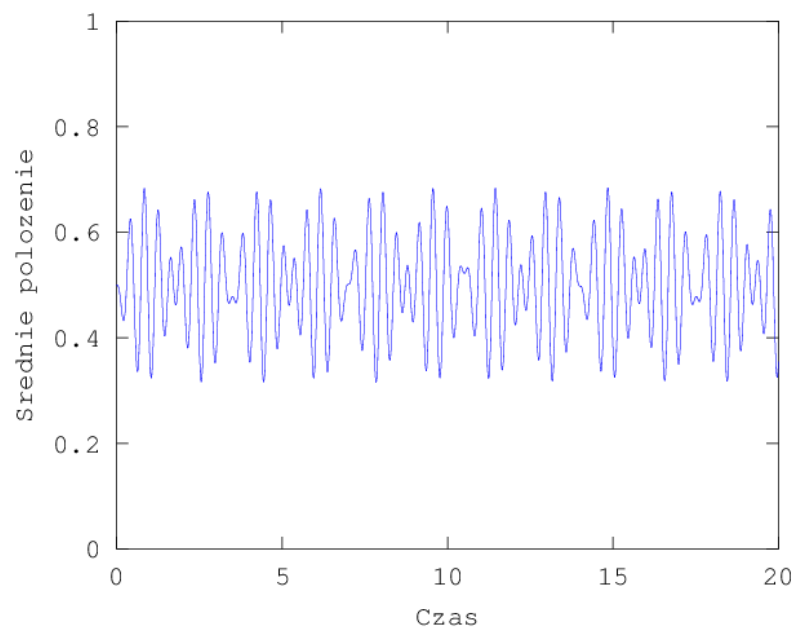
ω	Przejście rezonansowe
$3\pi^2/2$	$1 \rightarrow 2$
$4\pi^2/2$	$1 \rightarrow 3$
$8\pi^2/2$	nie
$15\pi^2/2$	$1 \rightarrow 4$



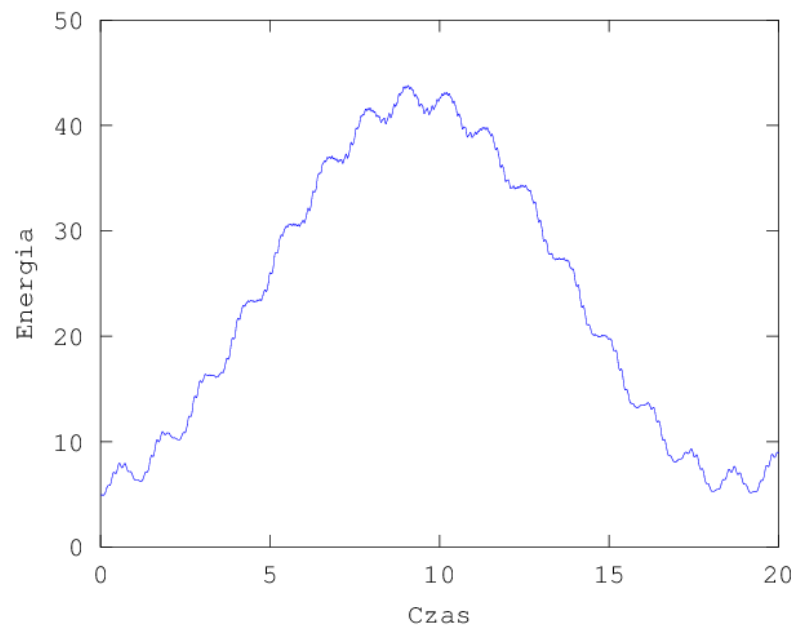
Rysunek 15: Wykres normy dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 3\pi^2/2$.



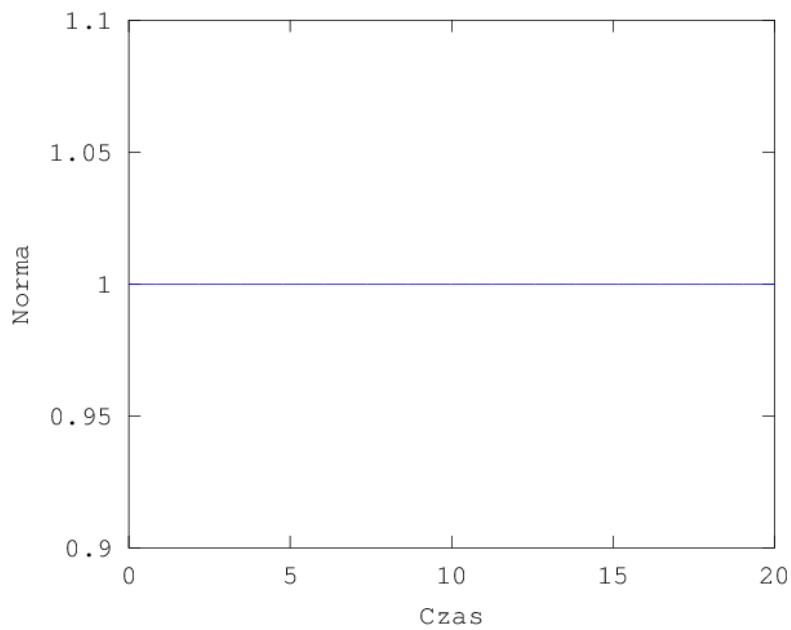
Rysunek 16: Wykres rozkładu prawdopodobieństwa na początku symulacji, w połowie symulacji oraz na końcu symulacji dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 3\pi^2/2$.



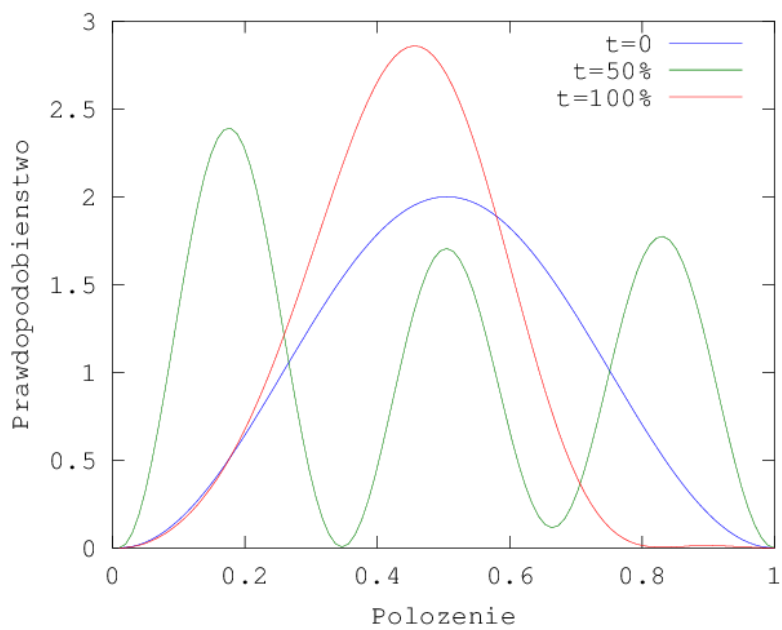
Rysunek 17: Wykres położenia cząstki dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 3\pi^2/2$.



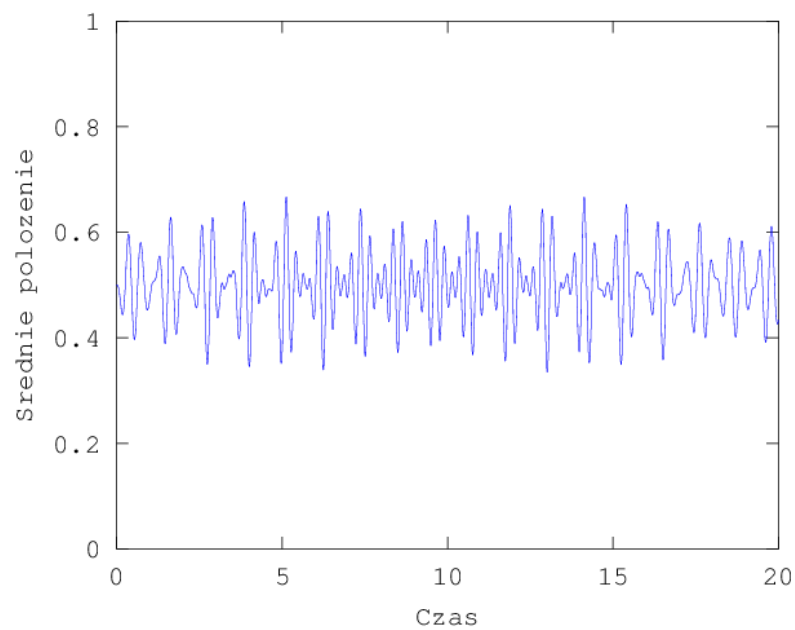
Rysunek 18: Wykres energii dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 4\pi^2/2$.



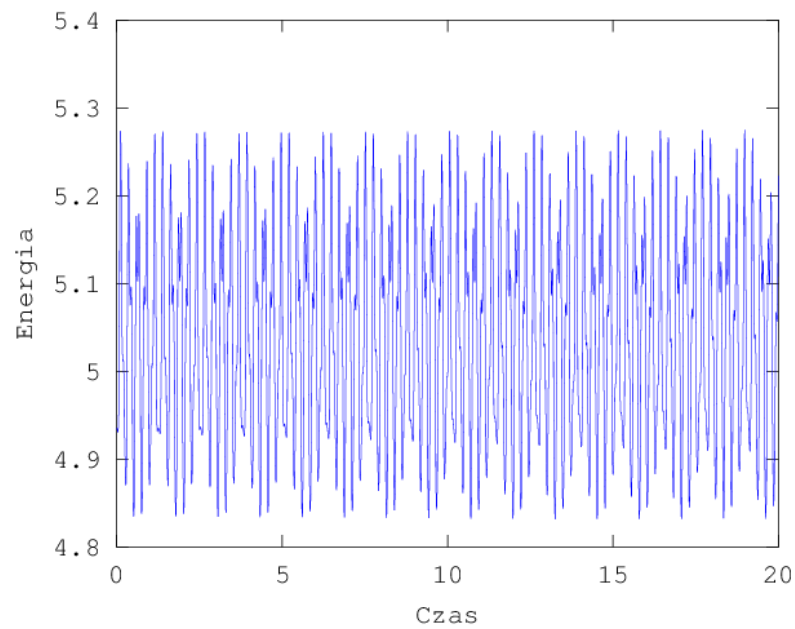
Rysunek 19: Wykres normy dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 4\pi^2/2$.



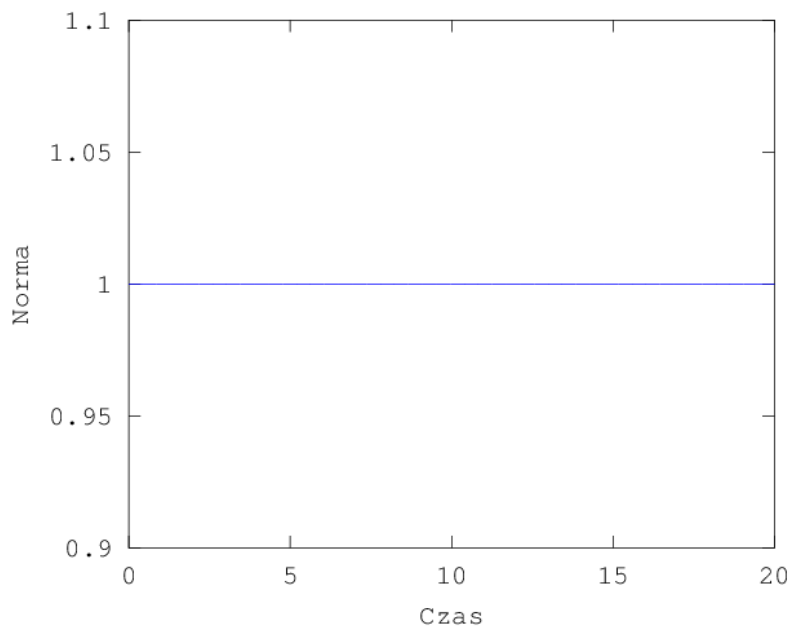
Rysunek 20: Wykres rozkładu prawdopodobieństwa na początku symulacji, w połowie symulacji oraz na końcu symulacji dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 4\pi^2/2$.



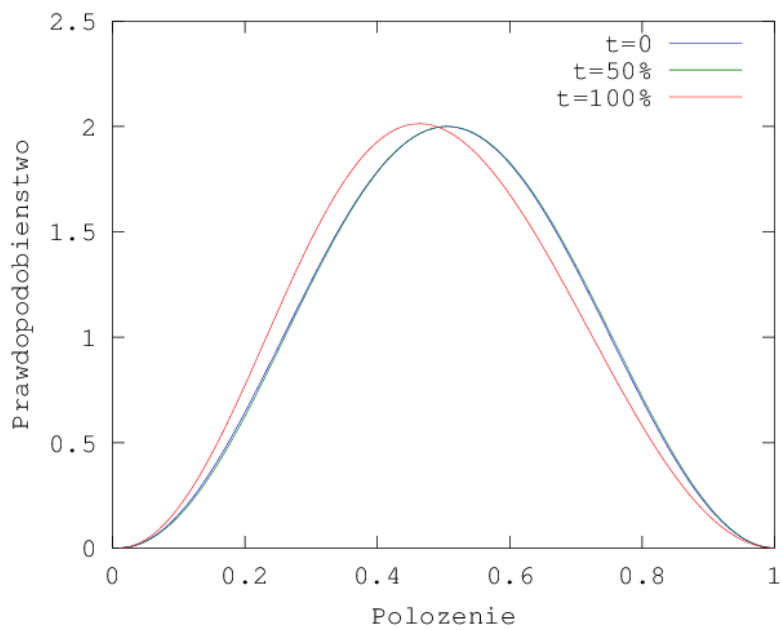
Rysunek 21: Wykres położenia cząstki dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 4\pi^2/2$.



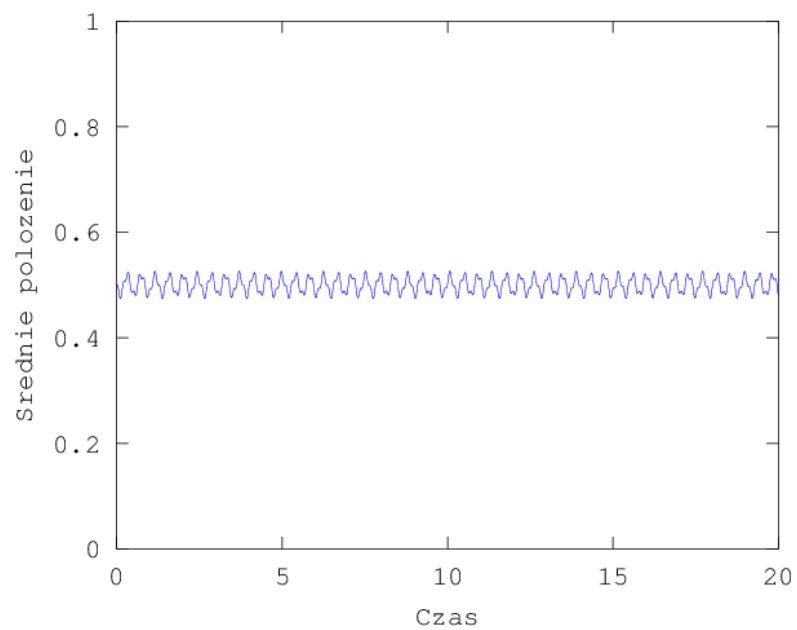
Rysunek 22: Wykres energii dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 8\pi^2/2$.



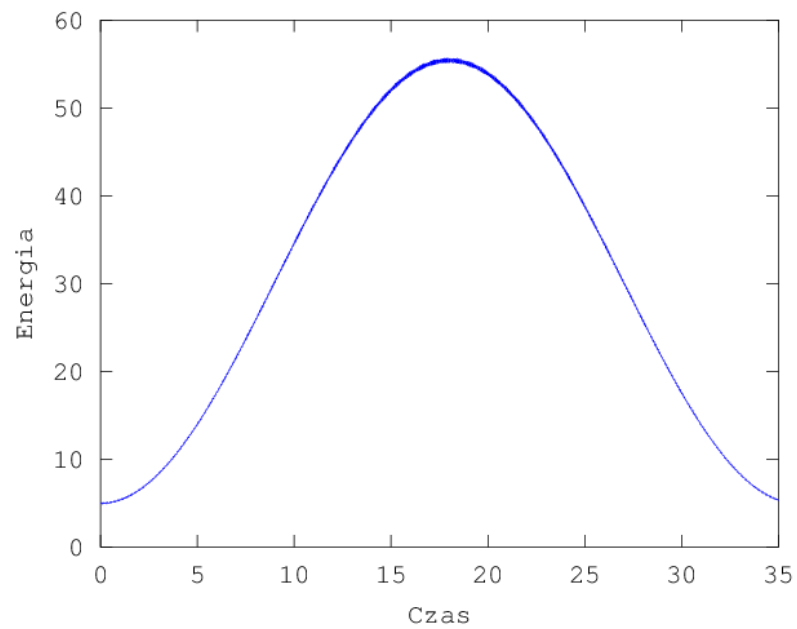
Rysunek 23: Wykres normy dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 8\pi^2/2$.



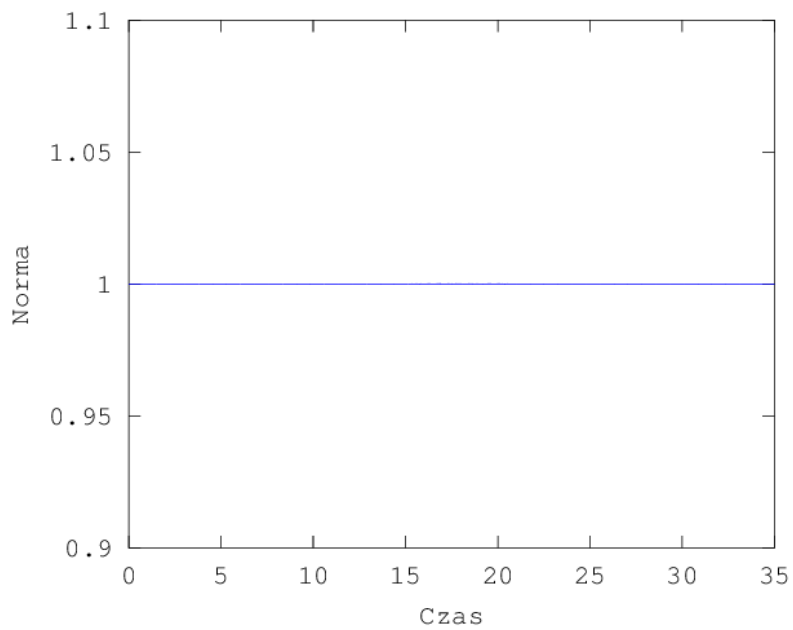
Rysunek 24: Wykres rozkładu prawdopodobieństwa na początku symulacji, w połowie symulacji oraz na końcu symulacji dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 8\pi^2/2$.



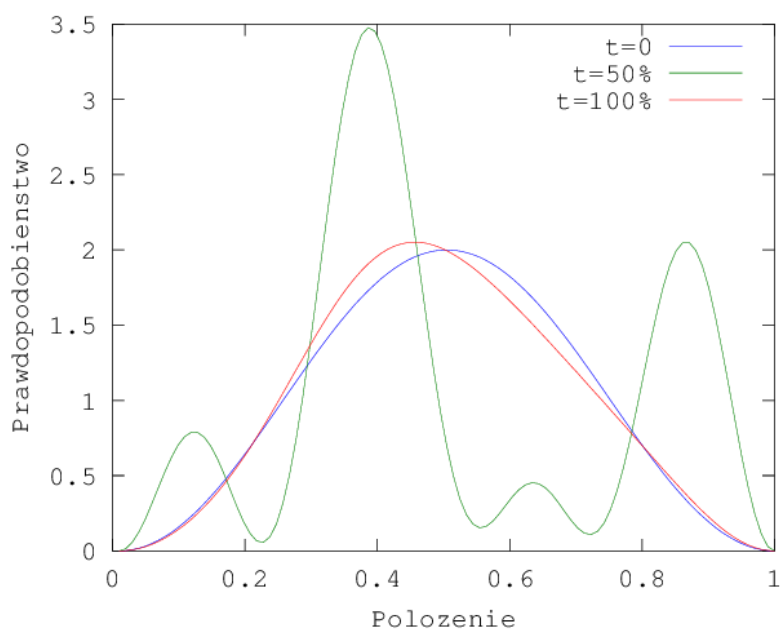
Rysunek 25: Wykres położenia cząstki dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 8\pi^2/2$.



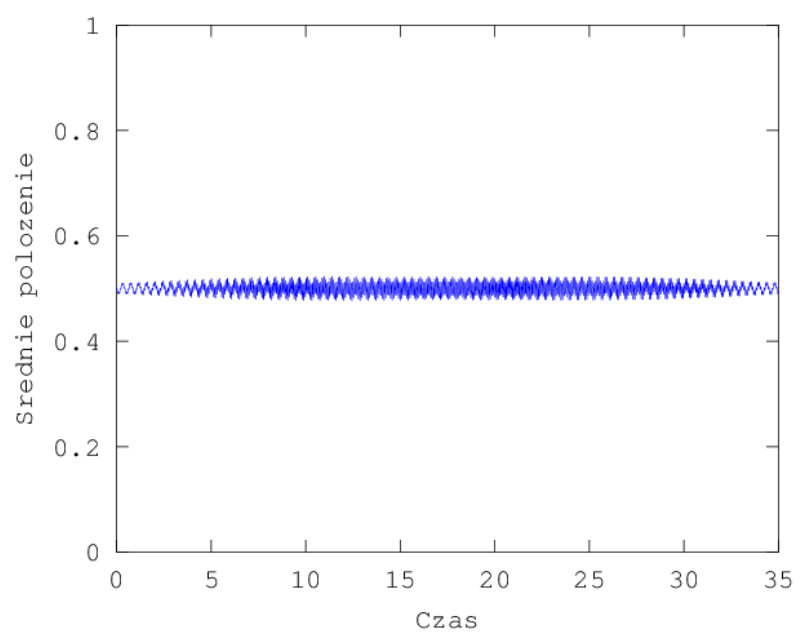
Rysunek 26: Wykres energii dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 15\pi^2/2$.



Rysunek 27: Wykres normy dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 15\pi^2/2$.



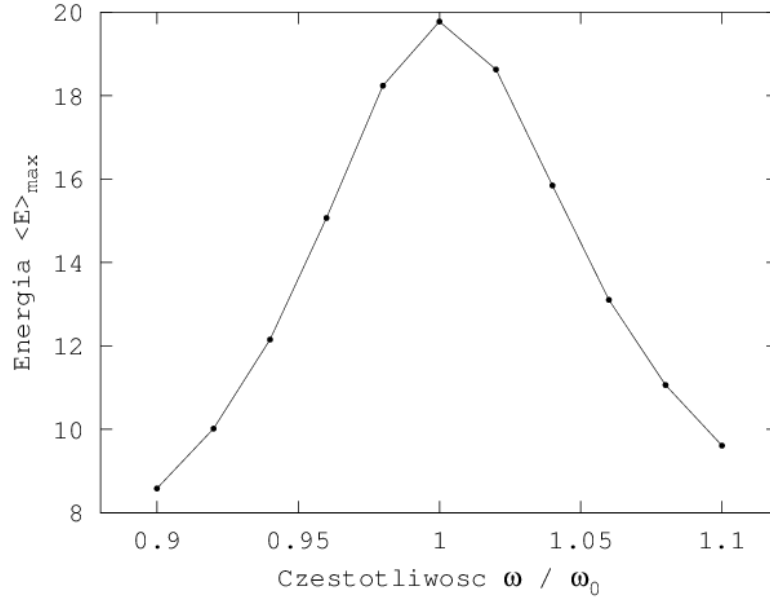
Rysunek 28: Wykres rozkładu prawdopodobieństwa na początku symulacji, w połowie symulacji oraz na końcu symulacji dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 15\pi^2/2$.



Rysunek 29: Wykres położenia cząstki dla poziomu energetycznego $n = 1$ i $\omega = 15\pi^2/2$.

2.3.1 Badanie okolicy rezonansu

Została wykonana seria symulacji w celu zbadania okolicy przejścia rezonansowego $1 \rightarrow 2$ ($\omega_0 = 3\pi^2/2$). Parametry symulacji: ilość kroków: 10000, $\kappa = 5$. Wyniki:



Rysunek 30: Wykres energii maksymalnej dla okolicy przejścia rezonansowego $1 \rightarrow 2$.

Widoczne jest maksimum energii dla częstotliwości rezonansowej, wskazujące zachodzenie przejścia $1 \rightarrow 2$.

3 Wnioski

W trakcie ćwiczenia została napisana aplikacja symulująca dynamikę kwantową naładowanej cząstki w nieskończonej studni potencjału. Wyniki zgadzają się z przewidywaniami teoretycznymi - położenie cząstki oscyluje wokół wartości 0.5 (w przypadku wyłączonego pola jest zawsze równe 0.5), ewolucja funkcji falowej jest zgodna z założeniami początkowymi: norma jest stała i równa 1, w przypadku braku pola nie występuje samoistna zmiana funkcji falowej. Badanie okolicy rezonansu wskazuje na istnienie przejścia na poziom wzbudzony w przypadku częstotliwości równej częstotliwości rezonansowej: widoczne jest maksimum energii dla tej częstotliwości.