Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики
УЧЕБНЫЙ ЦЕНТР ОБЩЕЙ ФИЗИКИ ФТФ

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

Группа **M32113** К работе допущен

Студент **Зыонг Тхи Хуэ Линь и Джахан Исрат** Работа выполнена

Преподаватель **Александр Адольфович Зинчик** Отчет принят

Рабочий протокол и отчёт по моделированию №1.

Прямоугольная потенциальная яма.

1. Цель работы
   Используя уравнение Шредингера, найти связные состояния и соответствующие им собственные значения в случае прямоугольной потенциальной ямы $V(x) = \begin{cases} -U, |x| < a \\ O, |x| > a \end{cases}$
   Найти также собственные функции и собственные значения для осцилляторного потенциала $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$ Построить графически собственные функции. Рассмотреть случай, когда в точке x=0 вводится бесконечно узкая и бесконечная полупроницаемая перегородка. Выявить влияние такой перегородки на стационарные состояния.
2. Прямоугольная потенциальная яма
   Уравнение шредингера

$$\nabla^2\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Psi = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\Psi = 0 \tag{2}$$

Следовательно

$$\begin{cases} \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}E, \forall|x| > a \\ \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E+U), \forall|x| < a \end{cases} \quad (3)$$

введем дополнительные обозначения

$$k_1^2 = -\frac{2m}{\hbar}E \quad (4)$$

$$k_2^2 = \frac{2m}{\hbar}(E+U) \quad (5)$$

Следовательно

$$\begin{cases} \Psi_1(x) = A_1 e^{k_1 x} & x < -a \\ \Psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} & |x| < a \\ \Psi_3(x) = B_3 e^{-k_1 x} & x > a \end{cases} \quad (6)$$

Выполним сшивание

$$\begin{cases} \Psi_1(-a) = \Psi_2(-a) \\ \Psi_1'(-a) = \Psi_2'(-a) \\ \Psi_2(a) = \Psi_3(a) \\ \Psi_2'(a) = \Psi_3'(a) \end{cases} \quad (7)$$

Так как яма симметрична относительно 0 можно рассмотреть только правую границу

$$\Psi_2(a) = \Psi_3(a)$$
$$\Psi_2'(a) = \Psi_3'(a)$$

Сшивая уравнения и исключая параметр α придём к уравнению вида
Так как аргумент arcsin должен лежать в промежутке от -1 до 1 мы

$$k_n a = \pi n - 2\arcsin\left(\frac{hk_n}{\sqrt{2mU}}\right) (7)$$

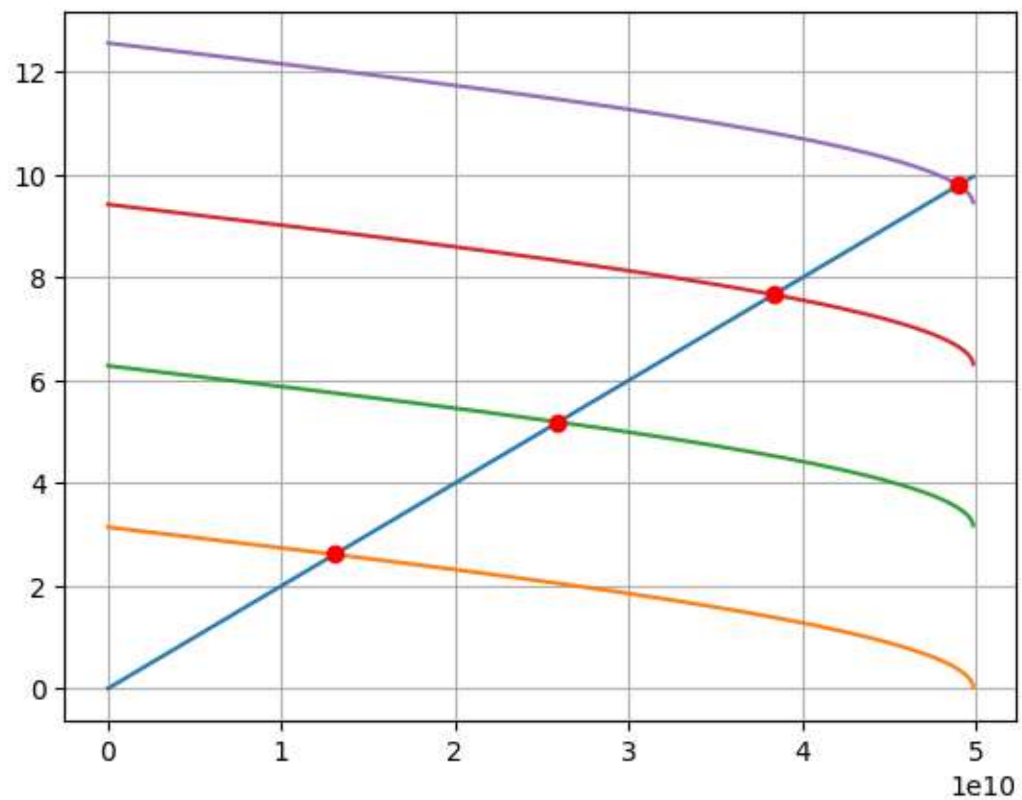
Здесь n = 1, 2, 3, …, n_{max} , при этом n_{max} соответствует наибольшему номеру точки пересечения
можем, так как аргумент arcsin должен лежать в промежутке от -1 до 1 мы можем найти максимальное значение k

$$k_{max} = \frac{\sqrt{2mU}}{\hbar} \qquad (10)$$

$$k_{max} = 49847972030.56564$$

Корни уравнения можно найти графическим путем, построив в координатных осях (x, y) и найдя точки пересечения

Теперь мы может решить графически наше уравнение

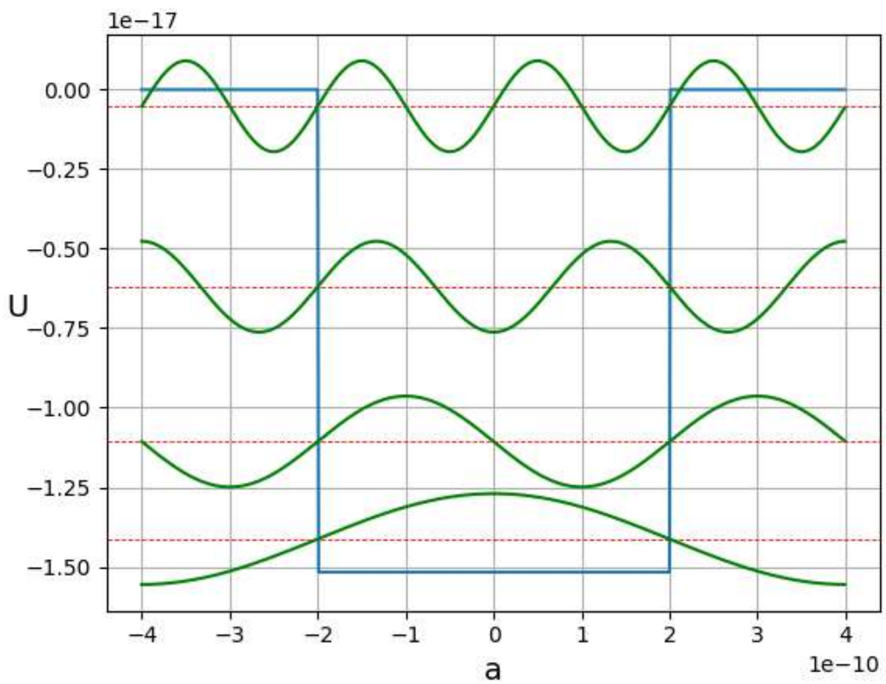


Получит корни из уравнения (7)
13050000000.0
25930000000.0
38340000000.0
48980000000.0
Корням уравнения (7) соответствуют энергии
Вычислим энергетические уровни и построим Ψ функции на них

$$E_n = \frac{h^2 {k_n}^2}{2m}$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{a}{2}} \sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right)$$

Вычисленная энергия связных состояний:
1.0395714747759467e-18 эВ
4.104293070745186e-18 эВ
8.972997524682033e-18 эВ
1.4644376721863024e-17 эВ



3. Осцилляторный потенциал

Уравнение шредингера для стационарных состояний одномерного осциллятора:

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{h^2}\left(E - \frac{m\omega^2x^2}{2}\right)\psi = 0$$

Переходя к безразмерным переменным

$$\xi = x\sqrt{\frac{k}{\hbar\omega}} = \frac{x}{x_0}, \text{ где } x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad \text{и} \quad \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega},$$

$$k = \omega^2 * m$$

Преобразуем уравнение шредингера

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\Psi = 0$$

Отсюда можно вывести

$$\Psi = C_n \cdot P_n(\xi)\exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right),$$

где $Pn((\xi))$ – полином Эрмита n-й степени, C_n – нормировочные коэффициенты

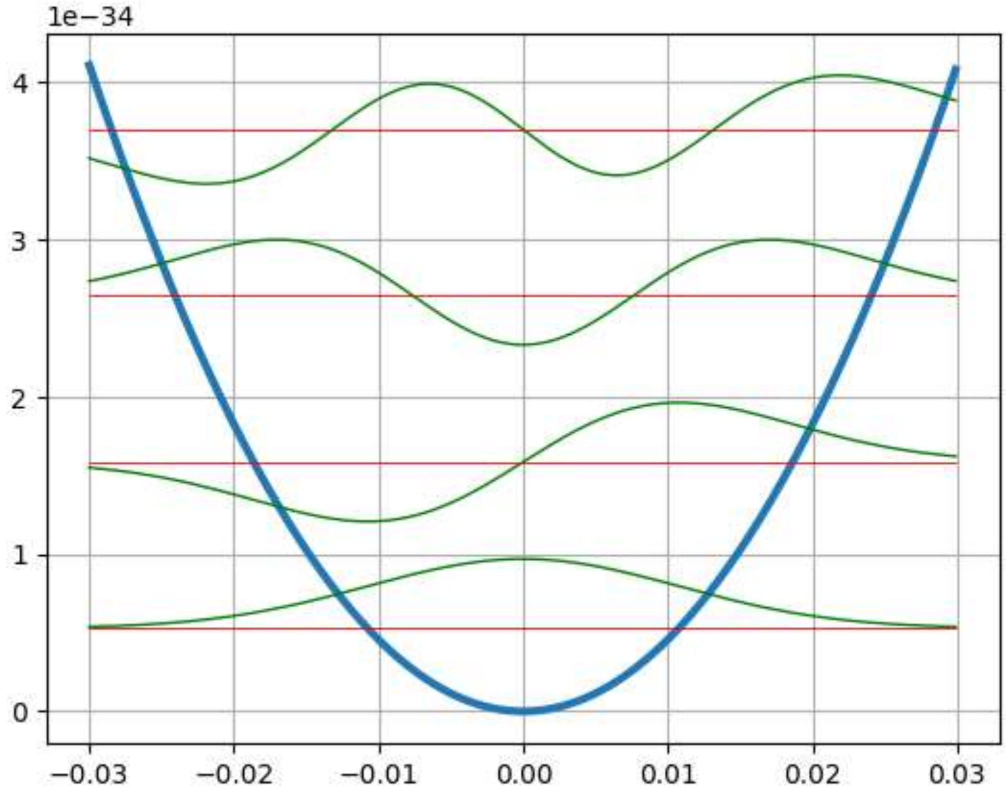
Вычисленная энергия связных состояний:

5.272859088230782e-35 эВ

1.5818577264692348e-34 эВ

2.636429544115391e-34 эВ

3.6910013617615478e-34 эВ



4. Выход

Были найдены связные состояния и собственные значения для всех случаев. Также были построены модели и графики с помощью языка Python. Выводы, полученные из работ приложены ниже списком:

- В яме любой ширины и глубины есть по крайней мере один четный дискретный уровень
- Чем больше глубина ямы U, и чем больше ее ширина 2a, тем больше число дискретных уровней энергии в яме

Код:
https://colab.research.google.com/drive/1kvTZg2k9drgDAlp6p3u7S8PCMohEBdnc#scrollTo=TFlQuVqwq9pe