

Komputerowe metody symulacji

- Dynamika kwantowa naładowanej cząstki w pudle w zmiennym polu elektrycznym

Kacper Ledwosiński

Grudzień 2021

1 Wstęp

Symulacja zachowania cząstki kwantowej w pudle o zmiennym polu elektrycznym. Dzięki metodą numerycznym rozwiązano równanie Shroedingera zależne od czasu i przedstawiono wyniki na animacji oraz wykresach: energii, średniego położenia oraz normy.

Symulacja została napisana w języku Python z dodatkowymi bibliotekami do graficznej reprezentacji danych matplotlib.

2 Symulacja

2.1 Oznaczenia

ψ to położenie fali w przestrzeni jednowymiarowej.

3 Wykonane eksperymenty

3.1 Badanie wielkości kroku czasu

Do zbadania wielkości kroku czasu przyjęto początkowo $\Delta\tau$ równe: 0.001. Otrzymanych wyników niestety nie da się zaprezentować na wykresie z uwagi na to, iż już po drugim kroku wszystkie dane wyjściowe były nieskończonością (w języku Python zapisane jako *inf*). Dlatego w kolejnych symulacjach przyjęto wielkość kroku symulacji: $\Delta\tau = 0.0001$. Dla takiego kroku liczby były rozsądne.

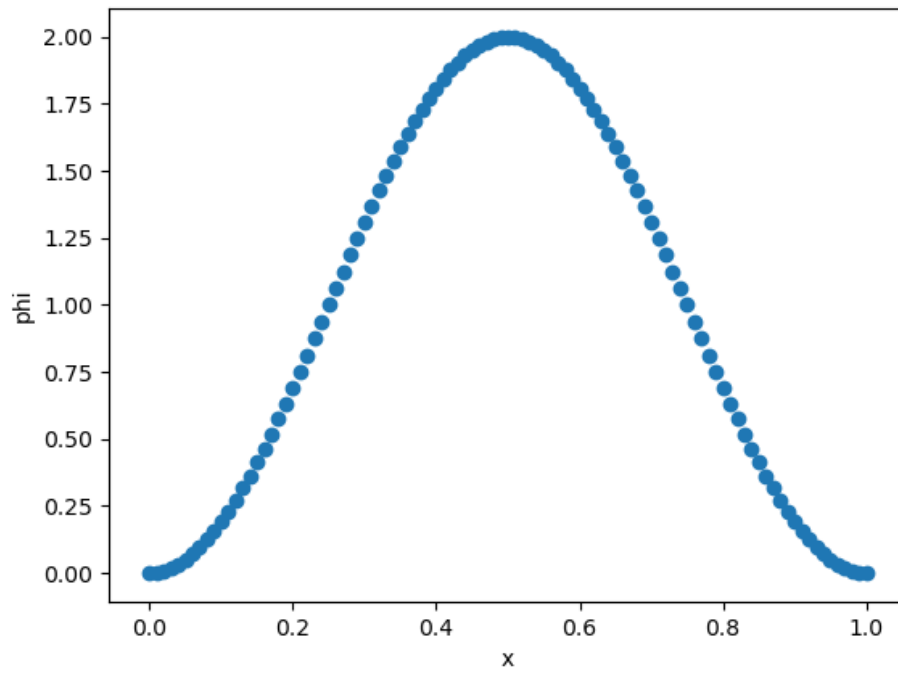
Poniżej konfiguracja wejściowych parametrów wykonanego badania:

```
100          #N
1  #n
0.001        #dtau
0  #K
0  #Omega
10000        #N_sim
100 #S_out
100 #S_dat
```

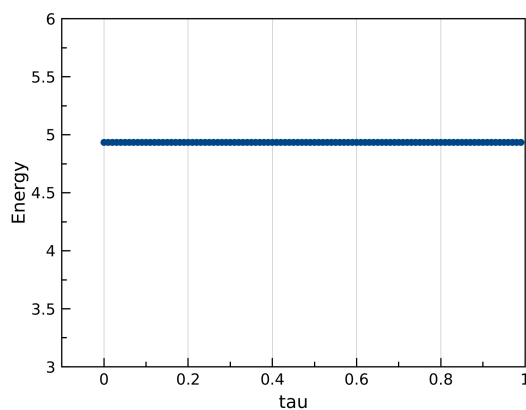
3.2 Zerowe pole elektryczne oraz zerowa prędkość kołowa zmian pola

Poniżej parametry symulacji dla uruchomionej symulacji:

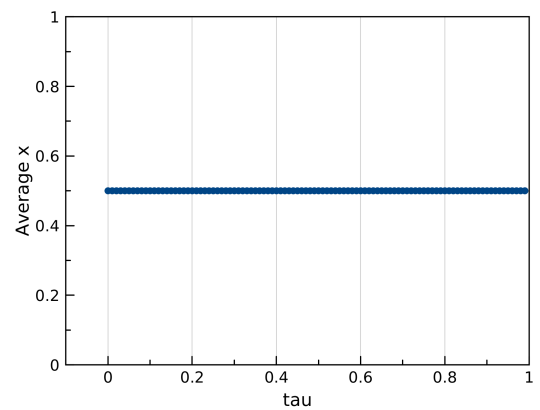
```
100 #N
1   #n
0.0001 #dtau
0   #K
0   #Omega
10000 #N_sim
100 #S_out
100 #S_dat
```



Rysunek 1: Symulacja nr 0 - wykres położenia fali



(a) Energia



(b) Średnie położenie

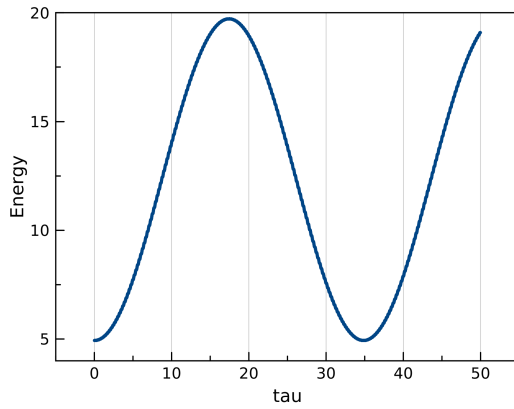
Rysunek 2: Parametry symulacji nr 0

Jak widać energia oraz średnie położenie są stałe podczas całości trwania symulacji. Brak pola elektrycznego pobudzającego cząsteczkę powoduje te zachowanie.

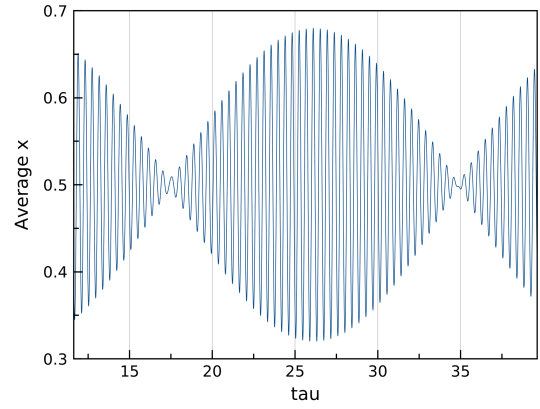
3.3 Jednostkowe pole elektryczne oraz prędkość kołowa rezonansowa $\omega = \frac{3\pi^2}{2}$

Poniżej parametry symulacji dla uruchomionej symulacji:

```
100 #N
1 #n
0.0001 #dtau
1 #K
14.8044066016 #Omega
500000 #N_sim
100 #S_out
100 #S_dat
```



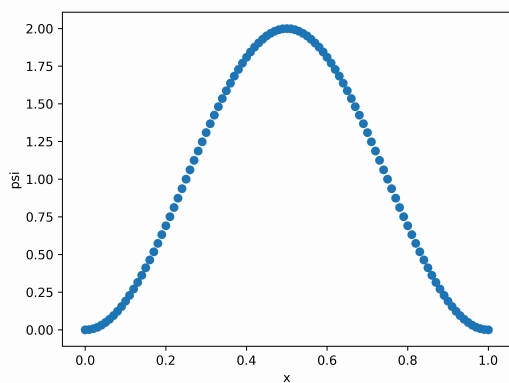
(a) Energia



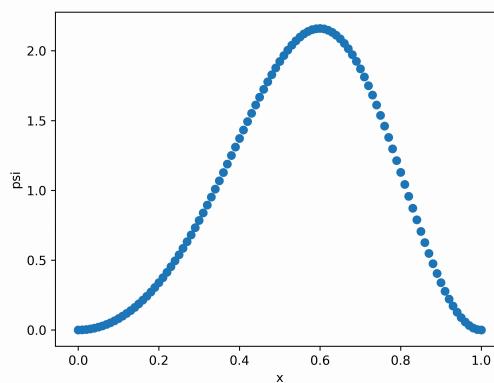
(b) Średnie położenie

Rysunek 3: Parametry symulacji nr 1

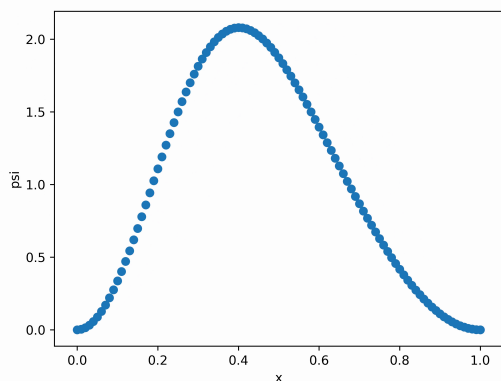
Kolejne kluczowe momenty symulacji:



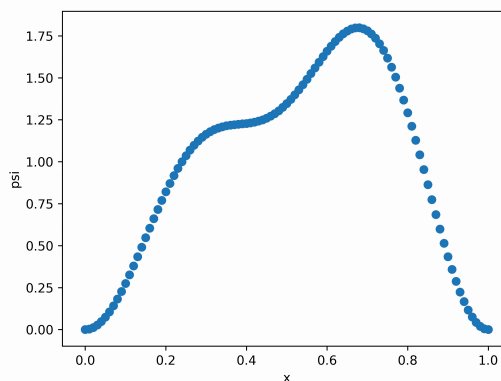
(a) Krok 1



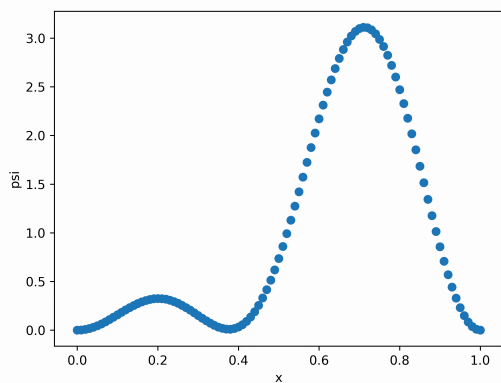
(b) Krok 2



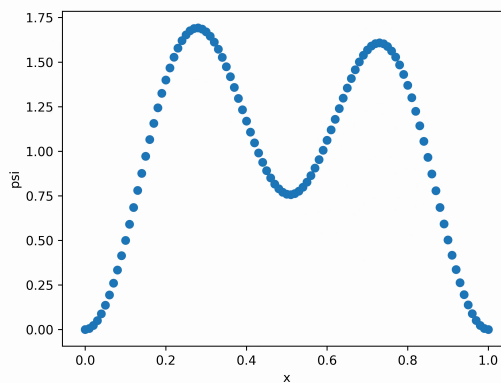
(c) Krok 3



(d) Krok 4



(e) Krok 5



(f) Krok 6

Rysunek 4: Przebieg symulacji nr 1

W pierwszej fazie fala zaczyna wahać się do przodu i do tyłu coraz to mocniej wychylając średnie położenie coraz bardziej ku granicom pudełka. Można to zauważyć na wykresie z Rysunku 3b gdzie symulacja znów przeszła do pierwotnego stanu po około 17 jednostkach czasu. Sekwencja zaczyna się od małych ruchów przechodząc w coraz szersze, aż w pewnym momencie widzimy jak zaczyna tworzyć się druga fala wychodząca on pierwotnej. Jest ona w przeciw-fazie do pierwotnej fali i coraz bardziej zaczyna "odrywać" się od jej "rodzica" (Rysunek 4d). Fala odrywa się kompletnie tworząc osobną falę w przeciw-fazie (Rysunek 4e i 4f). Symulacja po pewnym czasie się zapętla i wraca do stanu z kroku pierwszego.

Zachowanie takie spowodowane jest polem elektrycznym o prędkości kołowej rezonansowej. Powoduje ona oscylacje fali, a także jej podział.

4 Przejścia rezonansowe

$\omega \backslash n$	1	4	9
$3/2\pi^2$	* (16)	(19)	(22)
$5/2\pi^2$	(17)	(20)	(23)
$8/2\pi^2$	(18)	(21)	(24)

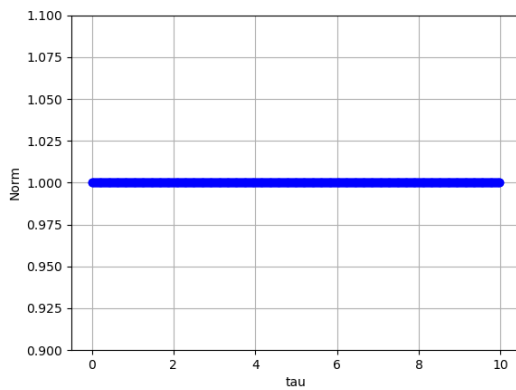
Tabela 1: W tabeli gwiazdką zostały zaznaczone układy w których występował rezonans. W nawiasach oznaczone są numery wykonywanej symulacji.

4.1 Symulacja nr 16

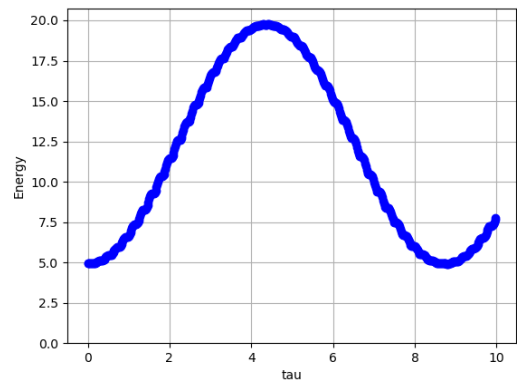
```

100      #N
1        #n
0.0001   #dtau
4        #K
14.8044066016 #Omega 3/2*pi^2
100000   #N_sim
200      #S_out
200      #S_dat

```

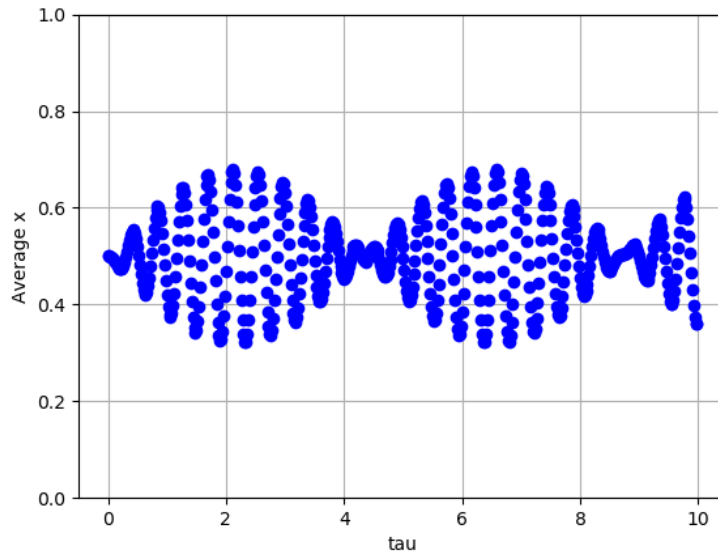


(a) Norma



(b) Energia

Rysunek 5: Parametry symulacji nr 16



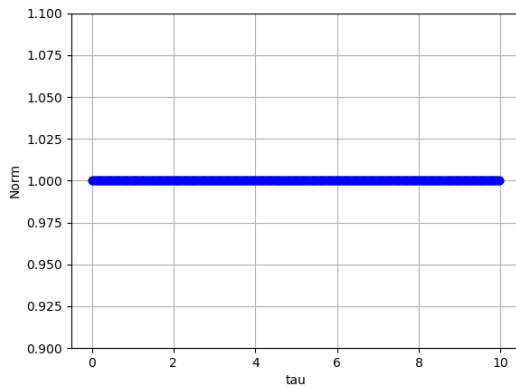
Rysunek 6: Średnie położenie symulacji nr 16

4.2 Symulacja nr 17

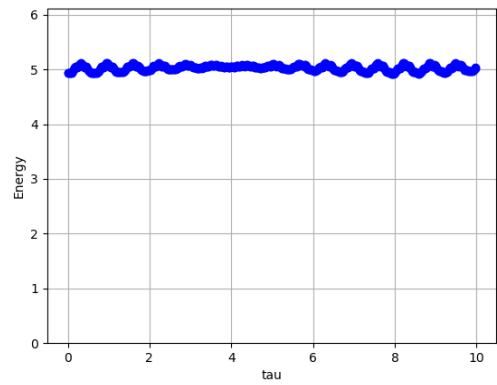
```

100      #N
1        #n
0.0001   #dtau
4        #K
24.6740110027 #Omega 5/2*pi^2
100000   #N_sim
200      #S_out
200      #S_dat

```

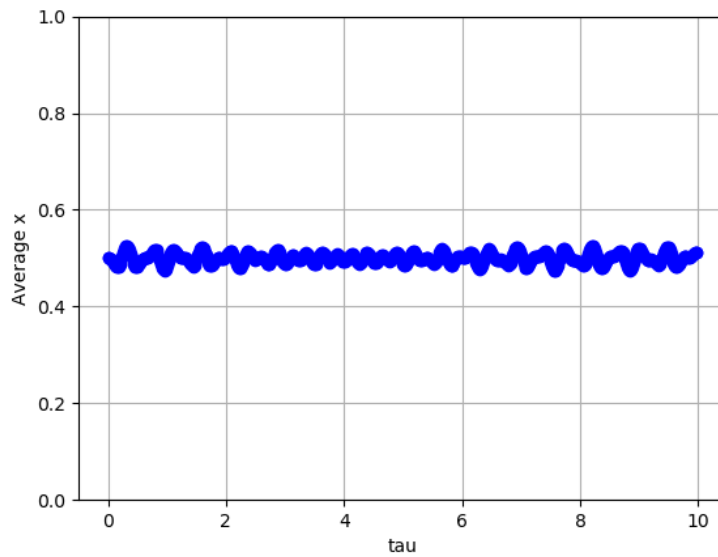


(a) Norma



(b) Energia

Rysunek 7: Parametry symulacji nr 17



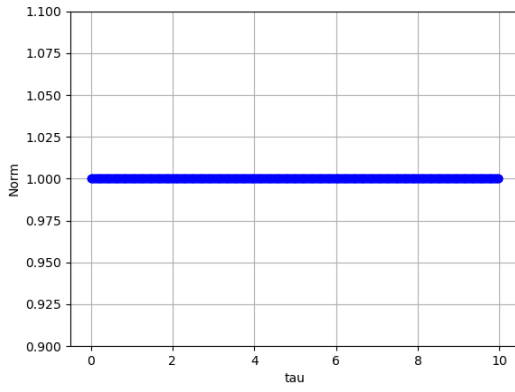
Rysunek 8: Średnie położenie symulacji nr 17

4.3 Symulacja nr 18

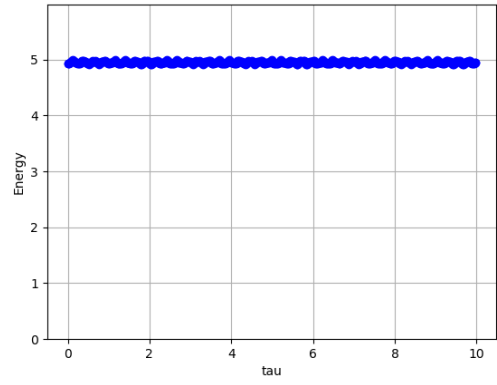
```

100      #N
1        #n
0.0001   #dtau
4        #K
39.4784176044 #Omega 8/2*pi^2
100000   #N_sim
200      #S_out
200      #S_dat

```

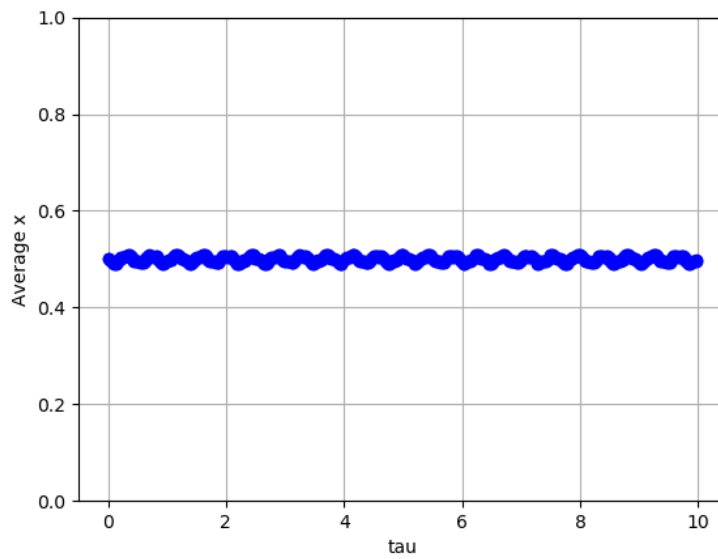


(a) Norma



(b) Energia

Rysunek 9: Parametry symulacji nr 18



Rysunek 10: Średnie położenie symulacji nr 18

5 Badanie przejścia rezonansowego

Podczas symulacji nr 16 wystąpiło przejście rezonansowe. Na Wykresie 5b można zauważyć maksimum. Jest ono związane z przejściem rezonansowym, które możemy obserwować na Wykresie 6.

Maksimum energii występuje po powrocie średniego położenia do centrum. Następnie cykl wykonywany jest "wstecz" i powraca do swojego pierwotnego stanu. Dzieje się to w okolicy 9 jednostki czasu symulacji. Na wykresie 5b oraz 6 możemy obserwować cykl od $\tau = 0j.cz.$ do $\tau \approx 9j.cz.$.