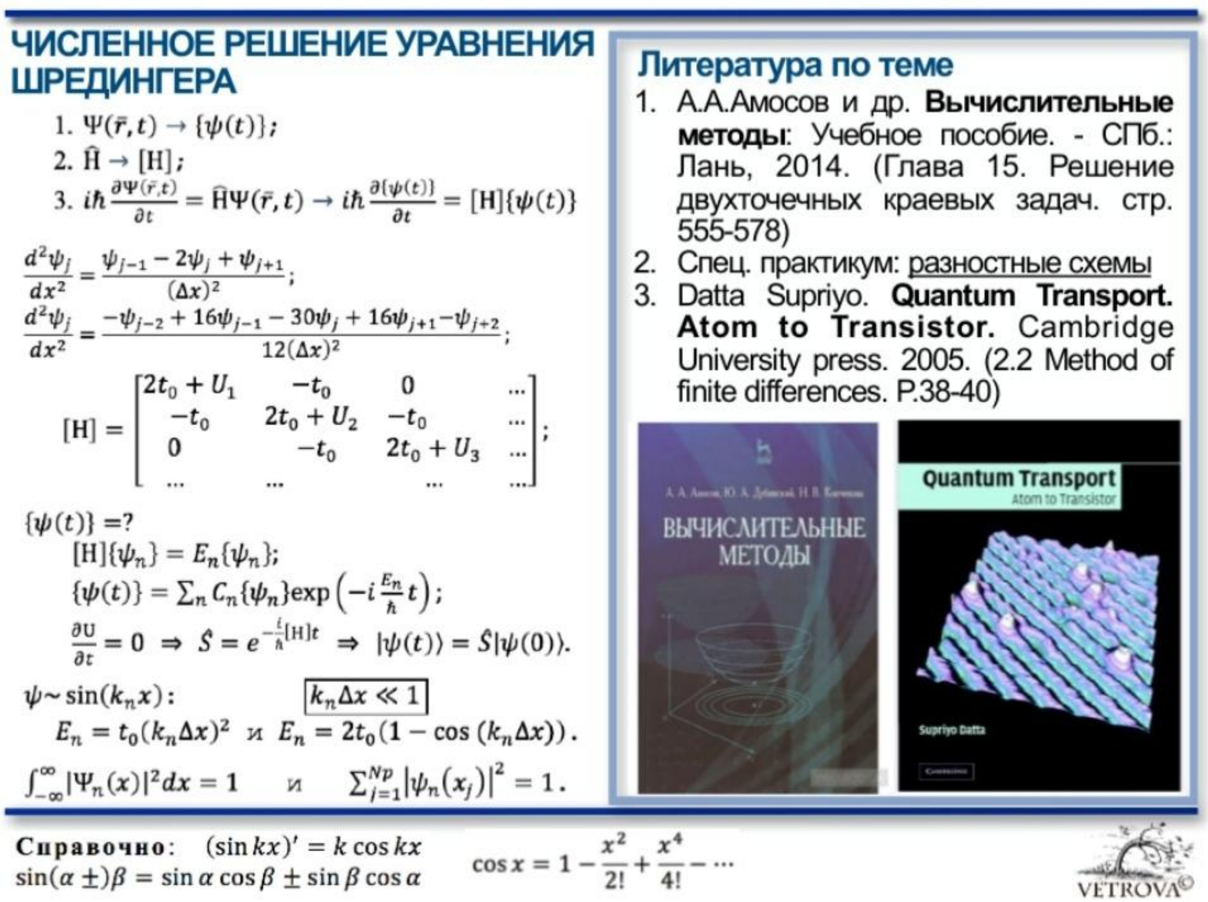
Филимонов Степан РЛ6-31

Лабараторная номер 5

Задача:

Необходимо отрисовать для электрона локализованного в одномерной бесконечно глубокой яме 10 нм график пси функции от координаты (для основного состояния и 24-го возбужденного). Сравнить графики полученный на основе аналитического решения уравнения Шрёдингера с результатами работы встроенной MATLAB-функции eig.

Фото задания:



Теория:

Квантовая яма с бесконечными стенками — область пространства размером порядка длины волны де Бройля рассматриваемой частицы (хотя бы в одном направлении), вне которой потенциальная энергия *U* бесконечна. Иногда данную область называют «ящиком»

Двухточечная краевая задача - это задача отыскания решения обыкновенного дифференциального уравнения или системы обыкновенных дифференциальных уравнений на отрезке $a \leq x \leq б$, в которой дополнительные условия на решение налагаются в двух точках а и б - "краях" отрезка (отсюда - и название задачи).

Решение:

Численное решение уравнения Шредингера(стационарного)

$$-\frac{\hbar}{2m}\Delta\psi(x)+U(x)\psi(x)=E\psi(x)$$

1. $\Psi(\bar{r},t)\rightarrow\{\psi(t)\}$
2. $\hat{\mathrm{H}}\rightarrow[\mathrm{H}]$;
3. $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\bar{r},t)=\hat{\mathrm{H}}\Psi(\bar{r},t)\rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\{\psi(t)\}=[\mathrm{H}]\{\psi(t)\}$

Из

$$\begin{cases}\psi_{i+1}=\psi_i+\Delta x\frac{d}{\mathrm{d}x}\psi_i+\frac{\Delta x^2}{2!}\frac{d^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_i+\frac{\Delta x^3}{3!}\frac{d^3}{\mathrm{d}x^3}\psi_i+\frac{\Delta x^4}{4!}\frac{d^4}{\mathrm{d}x^4}\psi_i+\ldots\\ \psi_{i-1}=\psi_i-\Delta x\frac{d}{\mathrm{d}x}\psi_i+\frac{\Delta x^2}{2!}\frac{d^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_i-\frac{\Delta x^3}{3!}\frac{d^3}{\mathrm{d}x^3}\psi_i+\frac{\Delta x^4}{4!}\frac{d^4}{\mathrm{d}x^4}\psi_i+\ldots\end{cases}$$

Получим:

$\frac{\psi_{i+1}-2\psi_i+\psi_{i-1}}{\Delta x^2}=\frac{d^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_i\Longrightarrow$ это трехточечная апроксимация оператора 2-ой производной , где

$$\mathrm{dx}=\frac{L}{N_p+1}$$

Подставим его:

$$-\frac{\hbar}{2m}\left[\frac{\psi_{i+1}-2\psi_i+\psi_{i-1}}{\Delta x^2}\right]+U_i\psi_i=E_i\psi_i$$

Матрицей этого уравнения будет

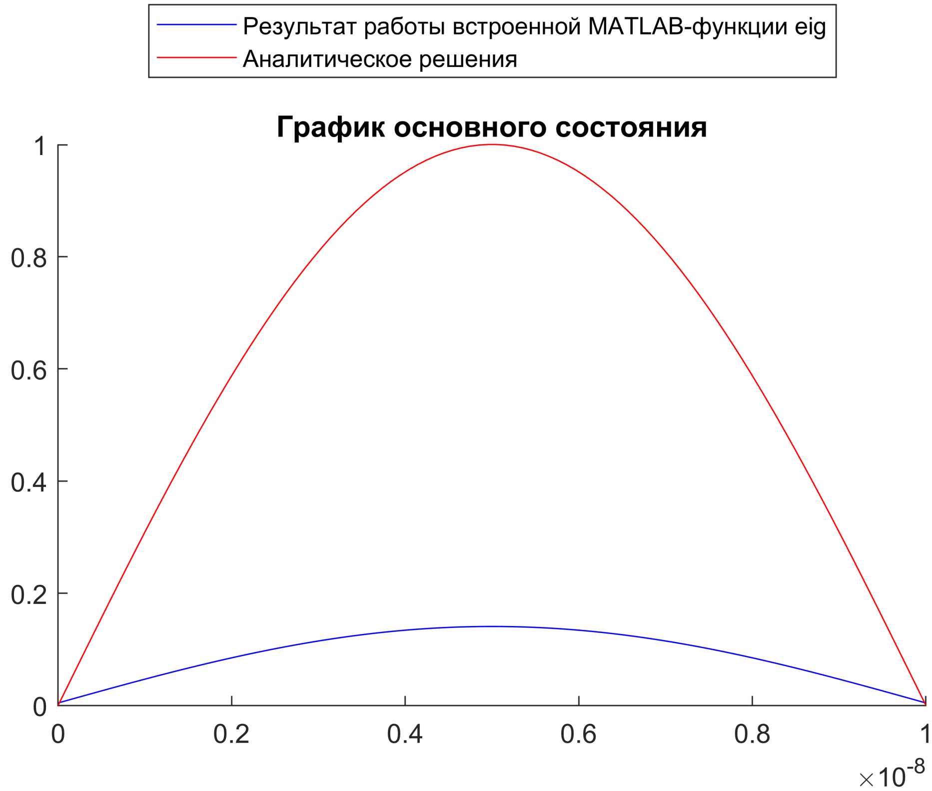
$[H]=\begin{bmatrix}2x_0+U_1 & -x_0 & 0 & \ldots\\ -x_0 & 2x_0+U_2 & -x_0 & \ldots\\ 0 & -x_0 & 2x_0+U_3 & \ldots\\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots\end{bmatrix}$, где x_0это константанта, равная $x_0=\frac{\hbar^2}{2m}*\frac{1}{\mathrm{dx}}$, U_i - матрица увеличивающая высоту, в нашей задаче = 0, по этому при вычислении учитывотся не будет

Аналитическое решение $\Upsilon=\sin\left(\pi\frac{\mathrm{condition}}{L}x\right)$, следует из $k=\frac{\mathrm{condition}*\pi}{L}$ и $\psi(x)=\mathrm{A}\sin(\mathrm{kx})$, в нашем случае $A=1$.

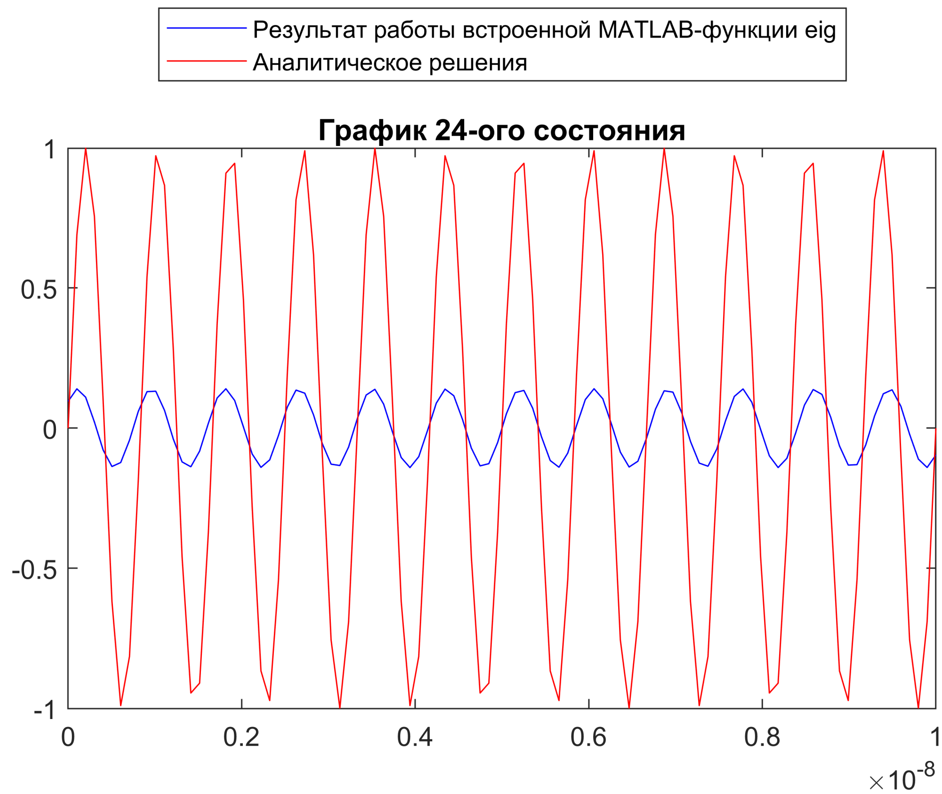
Код Matlab:

```
cla reset;
hold on;
L = 10;
Y = matrixSchrodinger(L); %*(см. ниже)
X = linspace(0, L * 1e-9, 100);
```

```
plot(X, Y(1:end, 1),"Color",'blue');
plot(X, Ycondition(1, L, X),"Color",'red'); %*(см. ниже)
title('График основного состояния');
legend('Результат работы встроенной MATLAB-функции eig','Аналитическое решения','Location',"nor
hold off;
```




```
plot(X, Psi(1:end, 24),"Color",'blue');
hold on;
plot(X, Ycondition(24, L, X),"Color",'red'); %*(см. ниже)
title('График 24-ого состояния');
legend('Результат работы встроенной MATLAB-функции eig','Аналитическое решения','Location',"nor
```




```
datetime('now')
```

```
ans = datetime
   17-Oct-2021 12:20:44
```

*Функция создания графика:

```
function yc = Ycondition(c, L, X)
 yc = sin((pi * c / (L * 1e-9))  * X);
end

function [Y, NonBuffer] = matrixSchrodinger(L)
 load("constans.mat","m0","hbar");
 Np = 100; % при 100 все стаблильно и красиво работает
 x0 = (hbar ^ 2) / (2 * m0 * (L * 1e-9) / (Np + 1));
 H = zeros(Np);
 H(1, 1) = 2 * x0; H(1, 2) = -x0;
 for r = 2:Np
   for c = 1:Np
     if and(and(r ~= 1, r ~= Np),r == c)
       H(r, c) = 2 * x0;
       H(r, c - 1) = -x0;
       H(r, c + 1) = -x0;
     end
   end
 end
 H(Np, Np) = 2 * x0; H(Np, Np - 1) = -x0;
```

```
  [Y, NonBuffer] = eig(H); % вернем диагональную матрицу
end
```