Równanie Schrödingera zależne od czasu

7 listopada 2024

1

Elektron (masa $m = 0.067m_0$ jak poprzednio) uwięziony jest w potencjale oscylatora harmonicznego $V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$. Operator energii $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$. Energia oscylatora $\hbar\omega = 5$ meV.

Do rozwiązania problemu ewolucji funkcji falowej wewnątrz potencjału $i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = H\Psi(x,t)$, wykorzystamy metodą Askara $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t - dt) + \frac{2dt}{i\hbar}H\Psi(x,t)$. Drugą pochodną zastąpimy ilorazem różnicowym, jak poprzednio.

2

Pracujemy w pudle $x \in [-100, 100]$ nm, na 201 punktach. Na ostatnim i pierwszym trzymamy warunek brzegowy $\Psi(\pm 100\mathrm{nm}, t) = 0$. Interesuje nas przedział czasowy $t \in [0, 10T]$, gdzie $T = \frac{2\pi}{\omega}$. Liczymy z krokiem czasowym $dt = 1$ [w jednostkach atomowych]. Jednostka atomowa czasu: 2.42×10^{-5} ps.

Wstawiamy jako warunek początkowy funkcję $\Psi(x, t = 0) = C\exp(-mw(x - x_0)^2/2)$. Funkcję proszę unormować (wyznaczyć C) jak na zajęciach z iteracji w czasie urojonym. Dla $\Psi(x, t = dt)$ przyjmiemy $\Psi(x, t = dt) = \Psi(x, t = 0) \times \exp(-i\frac{\omega dt}{2})$ (to nie jest dokładny wynik).

3

Przyjąć $x_0 = 30$ nm. Narysować $|\Psi(x,t)|^2$. Uwaga: wyprowadzać np. co 500 albo co 1000 krok czasowy. (40 pkt)

4

Policzyć wartość oczekiwaną położenia $\langle x\rangle(t)$ porównać z wynikiem klasycznym dla położenia cząstki punktowej $x(t) = x_0\cos(\omega t)$ (uwaga dla przyjętej funkcji falowej przy $t = 0$ średni pęd elektronu wynosi 0). (30 pkt)

5

Zmienić warunek początkowy na $x_0 = 0$. Jak zmienia się w czasie gęstość prawdopodobieństwa (20 pkt) ?

6

Zostawiamy $x_0 = 0$. Zerujemy potencjał. Mamy wtedy pakiet w nieskończonej studni potencjału. Jak zmienia się w czasie gęstość prawdopodobieństwa (10 pkt) ?