**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования**

**«Национальный исследовательский университет ИТМО»**

Факультет информационных технологий и программирования

Моделирование 1

*Собственные состояния и туннелирование в рамках одномерного уравнения Шрёдингера.*

**Выполнили студенты группы № М3311**

Сорокина Н.

Пестриков М.

Санкт-Петербург

2024

1) Цели работы:

Выполнить моделирование связанных состояний в прямоугольной потенциальной яме и определить вероятность туннелирования частицы через потенциальный барьер произвольной формы с использованием уравнения Шрёдингера.

2) Задачи:

Написать программу для расчёта собственных значений и собственных функций частицы в прямоугольной потенциальной яме при различных параметрах (ширина ямы, глубина потенциала).

Визуализировать зависимость собственных функций и энергетических уровней от параметров потенциальной ямы.

Реализовать расчёт вероятности туннелирования частицы через потенциальный барьер произвольной формы при заданной энергии и массе.

Проанализировать влияние формы и высоты потенциального барьера на вероятность туннелирования.

Часть 1

3.1) Теория:

Рассмотрим одномерную прямоугольную потенциальную яму глубиной и шириной :

Необходимо найти собственные состояния (волновые функции) и соответствующие им собственные значения энергии (энергетические уровни) частицы массы в этой потенциальной яме.

Уравнение Шрёдингера

Одномерное стационарное уравнение Шрёдингера имеет вид:

Внутри ямы ,

Подставляя в уравнение и преобразуя, получаем:

Где

Решение в области имеет вид:

Вне ямы ,

Подставляя в уравнение и преобразуя, получаем:

Где

Решение в области имеет вид:

Для нахождения конкретных значений коэффициентов , а также энергии , используются граничные условия:

1. Непрерывность волновой функции в точках :

2. Непрерывность первой производной волновой функции:

Эти условия приводят к трансцендентным уравнениям для собственных значений энергии.

Потенциал симметричен относительно , поэтому решения могут быть разделены на четные и нечетные.

Для **чётных решений** функция должна содержать только **чётную часть** – косинус:

Для **нечётных решений** функция должна содержать только **нечётную часть** –синус:

Вне ямы:

Для четных решений

Для нечетных решений

Получение трансцендентных уравнений

Для нахождения собственных значений энергии необходимо решить трансцендентные уравнения.

Четные решения:

Нечетные решения:

Где ,

Для решения трансцендентных уравнений используются численные методы. После нахождения соответствующие значения энергии вычисляются как:

После нахождения собственных значений , волновые функции вычисляются для всех состояний. Нормализация функций выполняется по правилу:

4.1) Ход решения:

Алгоритм реализации:

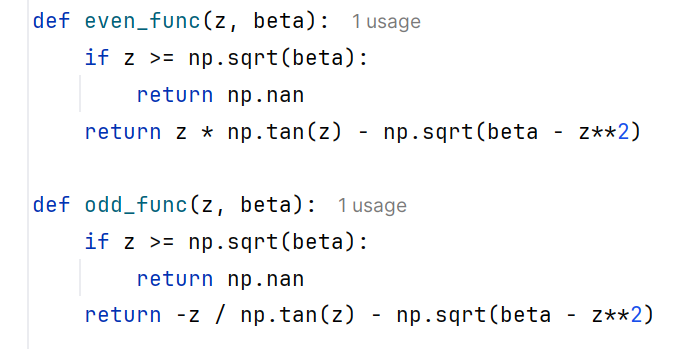
1. Задать параметр .

2. Для четных и нечетных решений решить трансцендентные уравнения для .

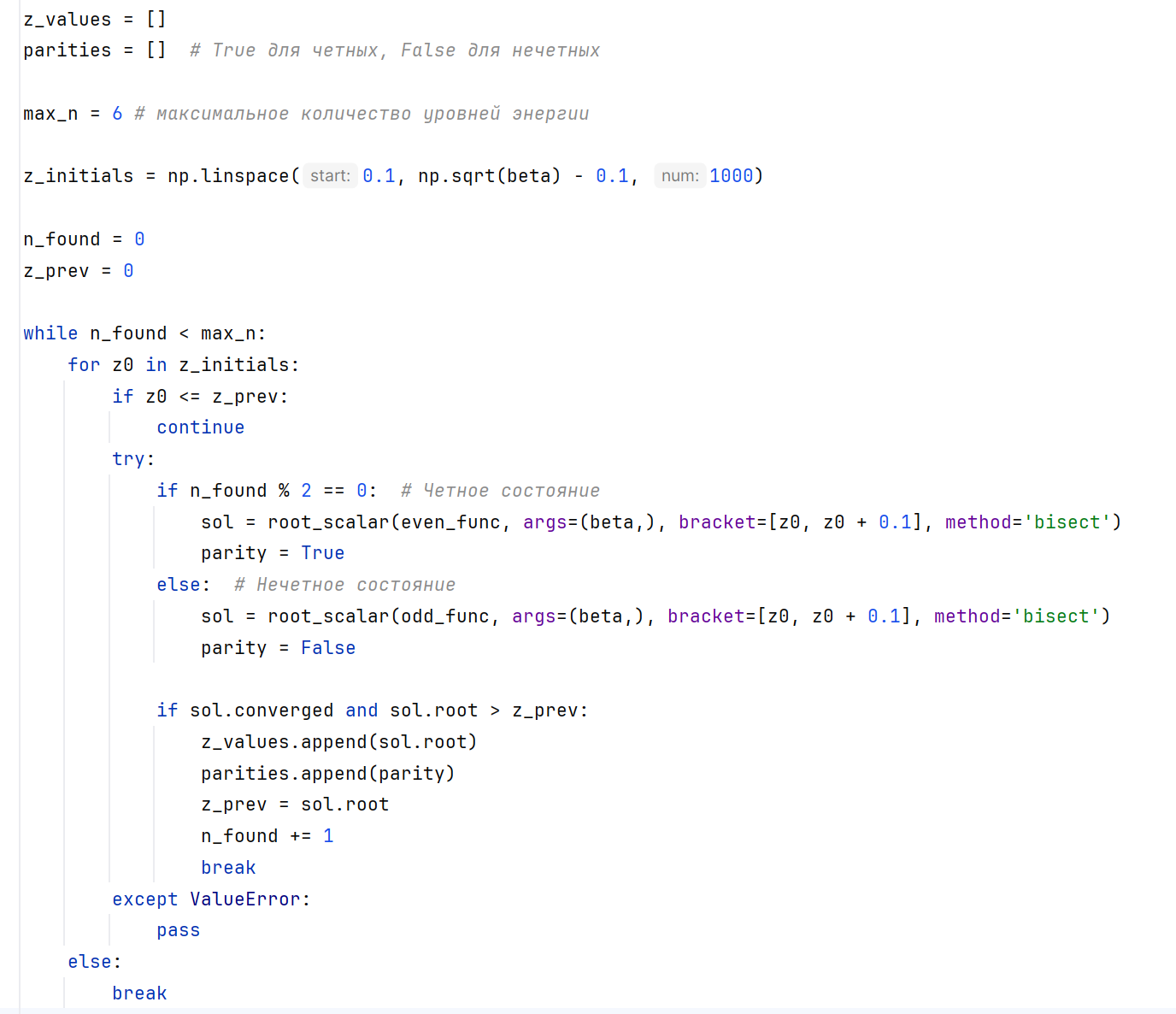
3. Вычислить энергии .

4. Построить соответствующие волновые функции .

Задаем функции для трансцендентных уравнений



Ищем собственные значения z, которые удовлетворяют трансцендентным уравнениям



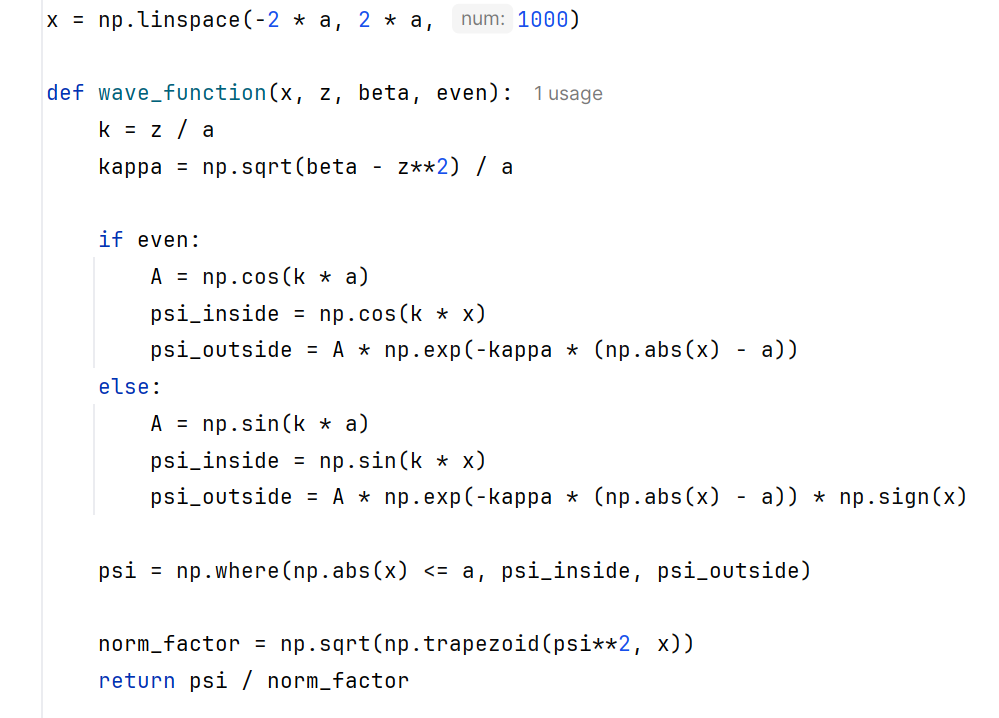
Цикл поиска корней. Используется метод root\_scalar для численного нахождения корней z на определённых интервалах.

Для каждого корня поочерёдно решаются уравнения чётного и нечётного типов. Интервал поиска корня задаётся как небольшая часть диапазона. Если корень найден, и он больше предыдущего, он добавляется в список решений.

Сортируем решения



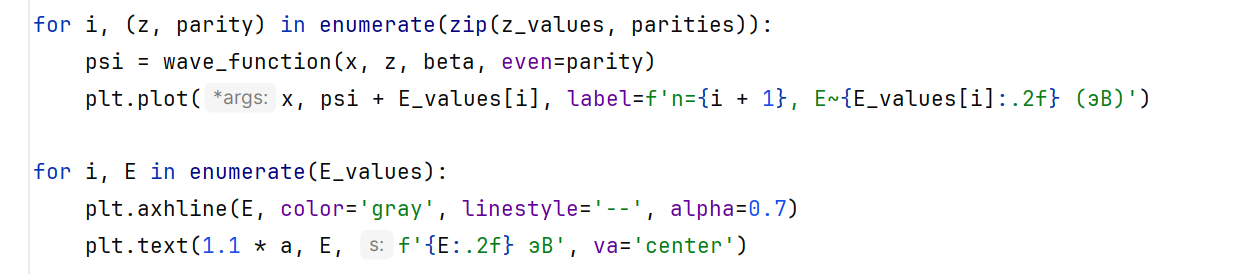
Задаем функцию для вычисления волновых функций



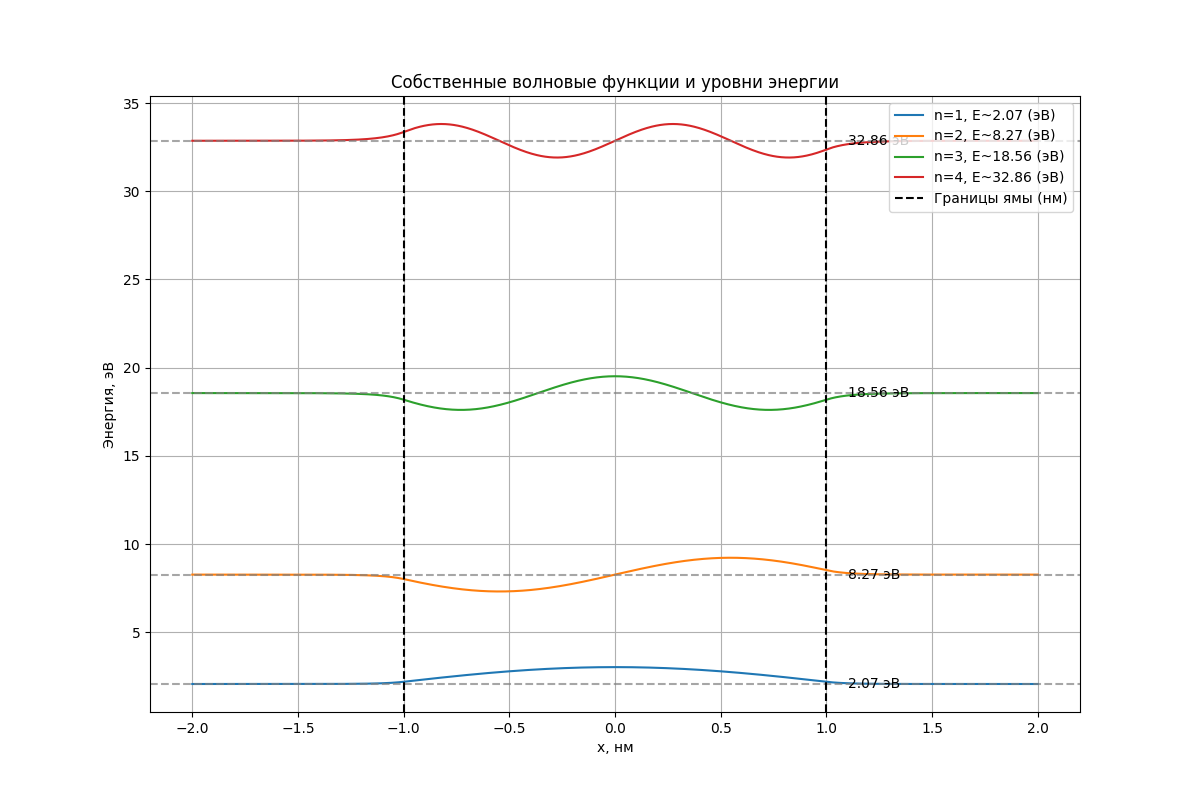
Задаем уравнения значений волновой функции внутри и вне ямы для четных и нечетных значений.

Задаем нормирующий коэффициент, численно решая интеграл

Вычисляем волновые функции для собственных значений, строим графики



5.1) Результаты:



Часть 2

3.2) Теория

Определить вероятность прохождения частицы с энергией и массой через потенциальный барьер произвольной формы в диапазоне ​

Одномерное стационарное уравнение Шрёдингера:

Необходимо найти значения функции в зависимости от разных значений при заданных и . Рассмотрим граничные значения:

При , волновая функция будет иметь следующий вид:

Где – амплитуда проходящей сквозь барьер волны.

Внутри барьера, функция будет иметь вид:

Где

После прохождения барьера функция будет иметь вид:

Где , – значение амплитуды волновой функции после прохождения барьера

Для того, чтобы найти вероятность прохождения через барьер, необходимо разделить амплитуду функции после прохождения барьера на амплитуду до:

Таким образом, зная числовое решение волновой функции в точке , можно найти амплитуду , и как итог коэффициент

Для итеративного метода нахождения коэффициента (то есть решения дифференциального уравнения) был выбран метод Рунге-Кутты 4 порядка

Решение методом Рунге-Кутты 4 порядка

Рассмотрим исходное уравнение:

Оно представляет собой дифференциальное уравнение 2-го порядка. Чтобы применить метод Рунге-Кутты, приведем его к системе уравнений 1 порядка:

Пусть , тогда уравнение можно записать системой:

Для неё уже можно применить метод Рунге-Кутты. В общем виде его формула выглядит так:

где – специальные коэффициенты, с отдельными формулами для расчета.

Для нашей системы расчет будет таким:

Для расчета коэффициентов введем и для обозначения правых частей системы:

,

И сами коэффициенты рассчитываются так:

,

,

,

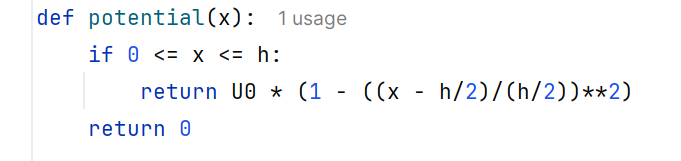
,

Таким образом, задав исходные значения и можно итеративно рассчитать значения функции и её производной в точке x = h. Начальные значения:

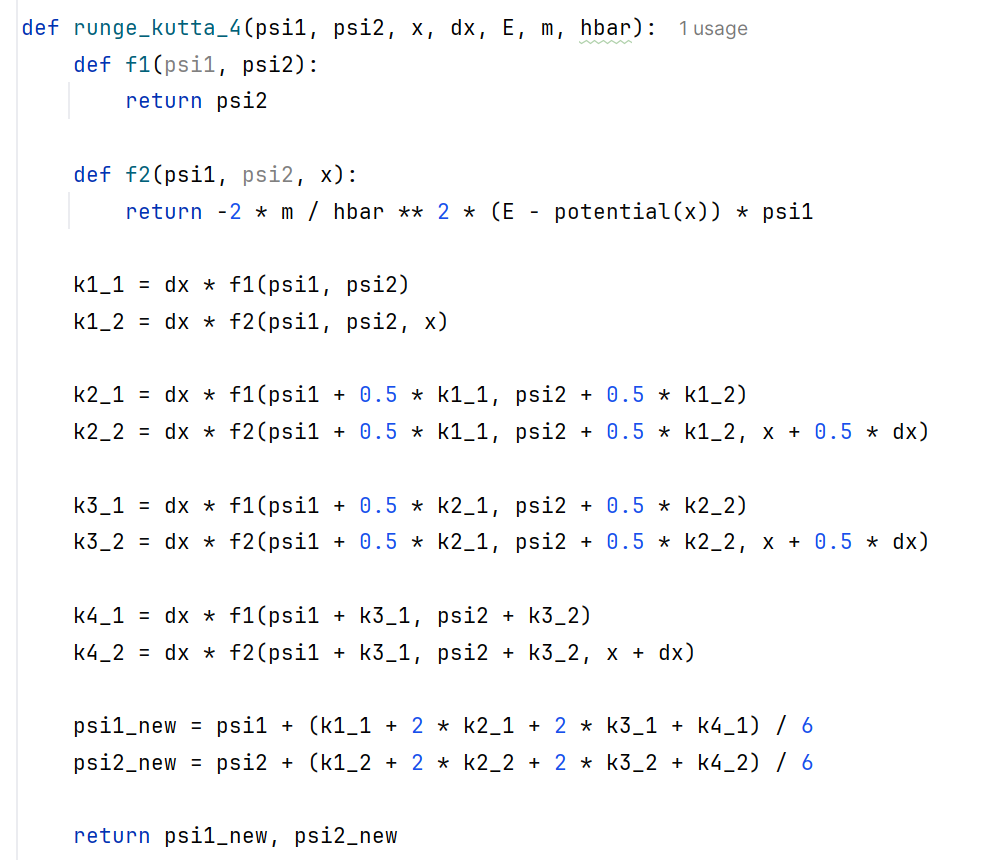
4.2) Ход решения

Будем использовать параболический барьер ,

Задаем функцию потенциального барьера

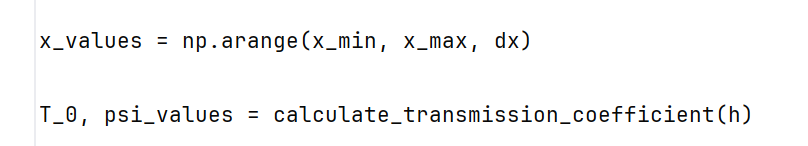


Задаем функцию численного решения уравнения Шрёдингера методом Рунге-Кутты

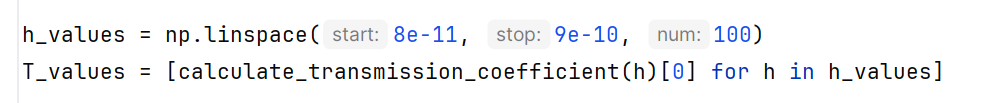


Функция вычисления коэффициента прохождения. Решается уравнение Шрёдингера на всём промежутке. Коэффициент прохождения T рассчитывается как отношение вероятности нахождения частицы справа от барьера (после прохождения через барьер) к начальной вероятности (до барьера).

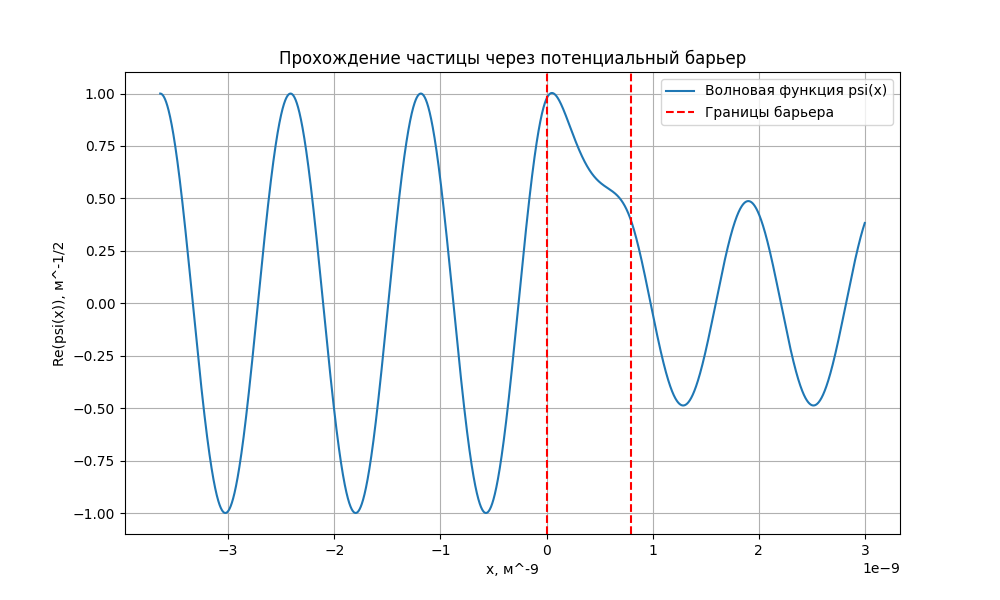
Рассчитываем коэффициенты прохождения и волновые функции

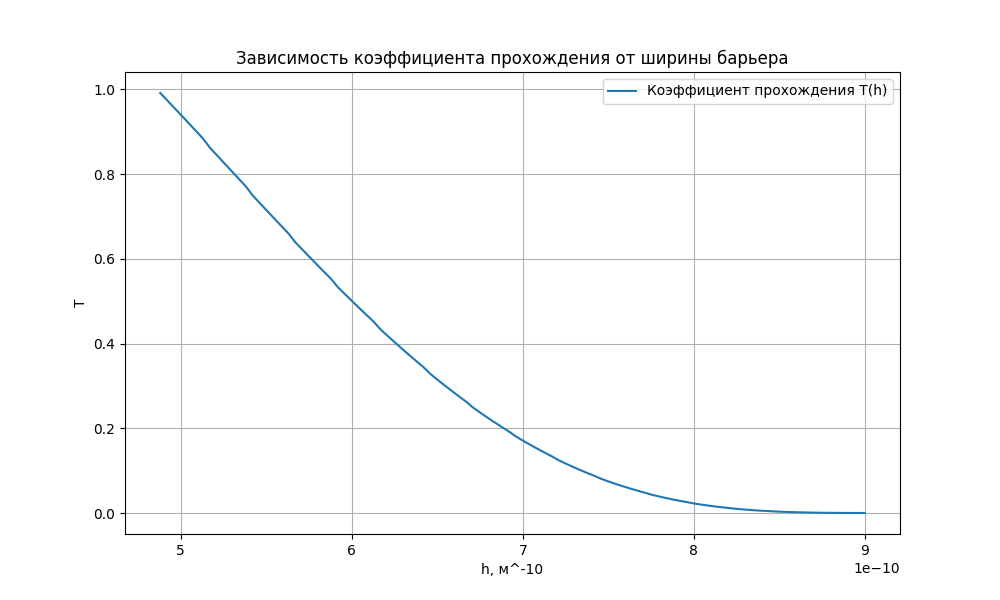


Зависимость коэффициента прохождения от ширины барьера



5.2) Результаты





6) Выводы:

В данной работе было проведено моделирование связанных состояний в прямоугольной потенциальной яме и определена вероятность туннелирования частицы через потенциальный барьер произвольной формы с использованием уравнения Шрёдингера.

Собственные состояния и энергетические уровни:

Были найдены собственные состояния и энергетические уровни частицы в прямоугольной потенциальной яме.

Волновые функции внутри ямы имеют синусоидальный или косинусоидальный вид, а вне ямы экспоненциально затухают.

Вероятность туннелирования:

Разработана программа для расчета вероятности туннелирования частицы через потенциальный барьер.

Использование метода Рунге-Кутты 4-го порядка позволило точно определить волновые функции и коэффициенты прохождения.

Анализ показал, что вероятность туннелирования уменьшается с увеличением ширины барьера.