Численное решение временного уравнения Шрёдингера и визуализация физических моделей на его основе.

Филиппенко Павел

МФТИ

2023

Цели и задачи

- Представить математическое описание эффекта квантового туннелирования
- Вывести формулы для коэффициентов надбарьерного и подбарьерного перехода
- Описать общий вид решения уравнения Шрёдингера, зависящего от времени
- Рассмотреть визуализацию различных моделей, пронаблюдать различные явления, описанные теоретически

Стационарное уравнение Шрёдингера

В терминах операторов уравнение Шрёдингера записывается следующим образом

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

где $\hat{H}$ – в данном случае оператор полной энергии (гамильтониан), E – полная энергия системы. Оператор $\hat{H}$ в свою очередь записывается

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$$

Тогда уравнение Шредингера можно переписать, как дифференциальное уравнение второго порядка

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0$$

ФРТК

Временное уравнение Шрёдингера

Для перехода к более общему случаю – уравнению, которое описывает волновую функцию ψ во времени, заменим в исходном уравнении E на соответствующий оператор.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$$

Таким образом, решение временного уравнения записывается следующим образом

$$\psi(r,t) = \phi(r)e^{-iEt}$$

ФРТК

Коэффициенты перехода

Рассматриваем прямоугольный потенциальный барьер со следующим распределением энергии

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_0 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

E – полная энергия частицы, a – ширина барьера.

Коэффициенты перехода

Коэффициент подбарьерного перехода

$$D = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \sinh^2 ka}$$

где $k = \dfrac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$

Коэффициент надбарьерного перехода

$$D = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \sin^2 ka}$$

где $k = \dfrac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}$.

Зависимость коэффициента подбарьерного перехода от энергии частицы

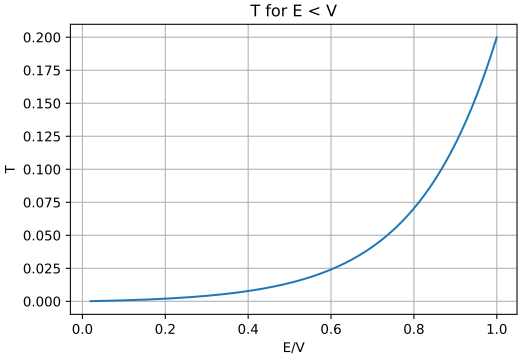


Рис.: Зависимость коэффициента подбарьерного перехода от энергии частицы

Зависимость коэффициента надбарьерного перехода от энергии частицы

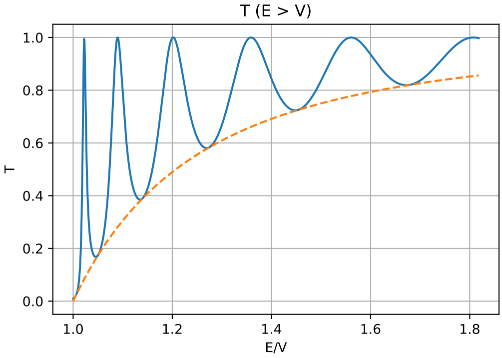


Рис.: Зависимость коэффициента надбарьерного перехода от энергии частицы

Средний импульс и срядняя координата

Зная значение волновой функции $\psi(x, t)$ в любой точке в любой момент времени, мы сможем расчитывать средние величины по формулам

$$\langle x \rangle = \int \psi^* x \psi dx$$

$$\langle p \rangle = \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx$$

ФРТК

Действительная и мнимая части волновой функции

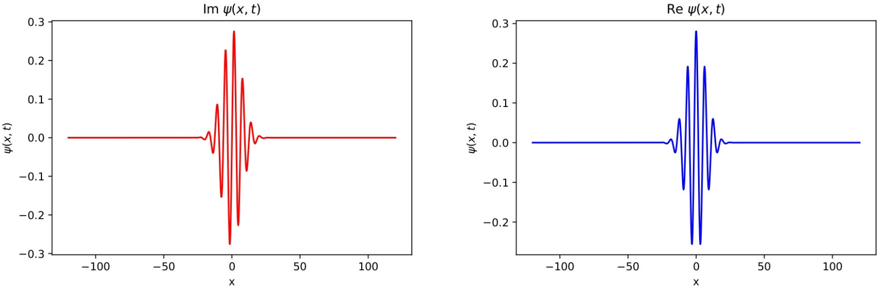


Рис.: Действительная и мнимая части волновой функции

Квадрат модуля волновой функции

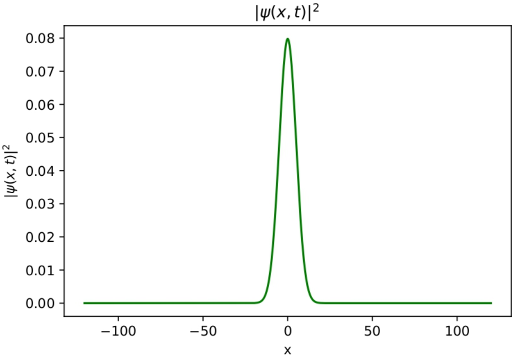


Рис.: Квадрат модуля волновой функции

Изменение волновой функции со временем

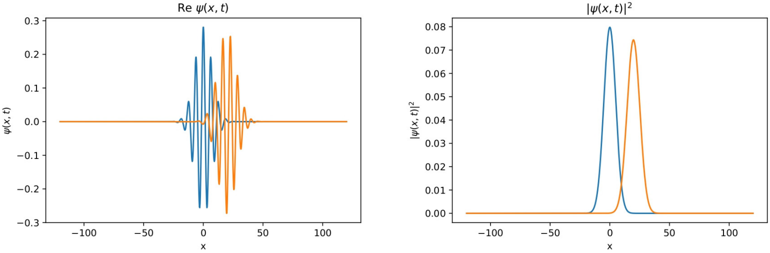
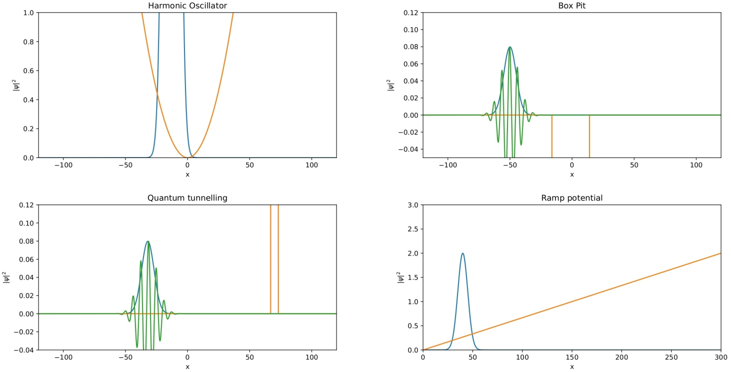


Рис.: Изменение волновой функции со временем

Примеры моделей



Примеры моделей