Московский Физико-Технический Институт
(государственный университет)

Государственный экзамен по общей физике. Вопрос по выбору.

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

Автор:
Филиппенко Павел Б01-009

ФРТК

Долгопрудный, 2023

Содержание

1 Постановка задачи

В рамках данной работы мы рассмотрим эффект надбарьерного и подбарьерного перехода квантовой частицы. Конктретно сконцентриуем внимание на эффекте квантового туннелирования. В практической части работы с помощью численного решения временного уравнения Шрёдингера мы смоделируем визуализацию волновой функции. Кроме того мы рассмотрим ее взаимодействие с различными видами потенциальных барьеров и пронаблюдаем зависимости различных параметров, полученных теоретическим путем.

2 Уравнение Шрёдингера

В терминах операторов уравнение Шрёдингера записывается следующим образом

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{1}$$

где $\hat{H}$ – в данном случае оператор полной энергии (гамильтониан), E – полная энергия квартовой частицы. Запишем выражение для оператора $\hat{H}$

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

где Δ – оператор Лапласа, U – потенциальная энергия. В рамках данной работы мы считаем, что потенциальная энергия является функцией чисто координаты, то есть не зависит от вермени. Тогда уравнение Шредингера можно переписать, как дифференциальное уравнение второго порядка

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\psi = 0 \tag{3}$$

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

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi \tag{4}$$

Заметим, что в соответствии с теорией дифференциальных уравнений для нахождения решения для всех моментов времени необходимо единственное начальное решение $\psi(r, 0)$.

Заметим так же, что оператор $\hat{H}$ не зависит от времени и действует только на функции от координат. Это позволяет произвести разделение переменных r и t.

$$\psi(r, t) = f(t)\phi(r)$$

Подставляя в уравнение, получим

$$i\hbar\psi(r)\frac{df}{dt} = f(t)\hat{H}\phi(r)$$

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{df}{dt} = \frac{1}{\phi(r)}\hat{H}\phi(r)$$

В равенстве левая и правая части зависят от разных переменных, таким образом, чтобы равенство было верным, необходимо, чтобы обе части уравнения были постоянными. Обозначим

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{df}{dt} = \frac{1}{\phi(r)}\hat{H}\phi(r) = E$$

Тогда, с одной стороны мы получаем уравнение для стационарного случая

$$\hat{H}\phi(r) = E\phi(r)$$

а с другой стороны решение части, зависящей от времени

$$f(t) = const \cdot e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$$

Таким образом, решение временного уравнения записывается следующим образом

$$\psi(r,t) = \phi(r)e^{-iEt} \tag{5}$$

3 Прямоугольный потенциальный барьер

Основной задачей в данном разделе будет получение выражения для коэффициентов надбарьерного перехода (в случае $E > U$) и подбарьерного перехода (в случае $E < U$).

При решении подобных задач стандартный способ заключается в составлении уравнений Шрёдингера для различных зон, в зависимости от распределения потенциальной энергии, а так же записи граничных условий. Общий вид такого стационарного уравнения

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2\psi = 0 \tag{6}$$

где

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U) \tag{7}$$

Будем обозначать r и d – коэффициенты отражения и прохождения по амплитуде соответственно, R и D – коэффициенты отражения и прохождения по энергии. Записывая систему уравнений для различных зон, а так же граничные условия, можно установить выражения для коэффициентов r и d:

$$r = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \tag{8}$$

$$d = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \tag{9}$$

Выражения для коэффициентов отражения и прохождения по энергии выводятся с применения понятия плотности потока вероятности

$$R = |r|^2 \tag{10}$$

$$\frac{k_2}{k_1}|d|^2 \tag{11}$$

Подробный вывод данных формул в рамках данной работы мы опустим.

Рассмотрим некоторые общие соотношения, связывающие амплитудные коэффициенты отражения и пропускания волн де Бройля на границе барьера.

Рассматривая рисунок 1 обозначим за r, d амплитудные коэффициенты в случае, когда волна распространяется слева направо, и r', d' когда волна распространяется справа налево. Утверждается, что если поменять направления всех волн без изменения их амплитуд, то граничные условия не изменятся. В любом случае на границе должен выполняться баланс амплитуд прошедших и отраженных волн. Используя это утверждение, можно записать

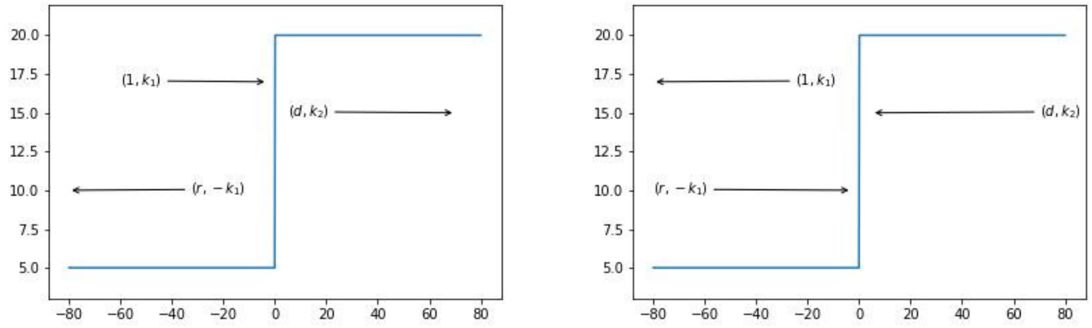

Рис. 1: Волны на границе

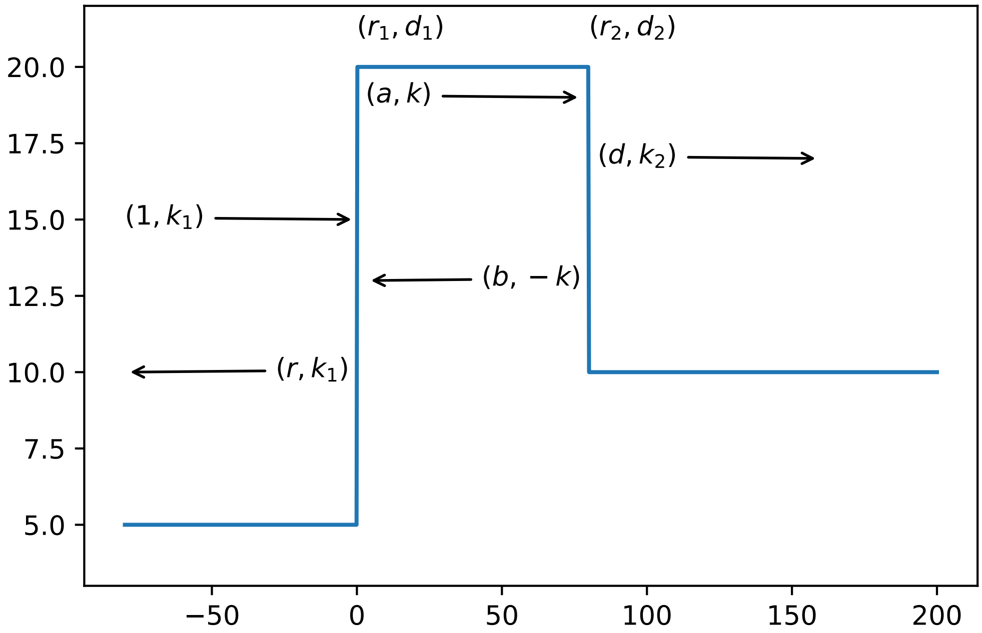

Рис. 2: Прохождение волны через потенциальный барьер

$$\begin{cases} r^2 + dd' = 1 \\ rd + dr' = 0 \end{cases} \tag{12}$$

откуда получаем важноые соотношения $r = -r'$, $d' = \dfrac{1-r}{d}$. Мы воспользуемся ими дальше, а сейчас перейдем, наконец, к рассмотрению нашей непосредственной задачи.

В данном случае, потенциал в пространстве распределен следующим образом

$$U(x) = \begin{cases} U_1 & x < 0 \\ U & 0 \leq x \leq a \\ U_2 & x > a \end{cases} \tag{13}$$

Запишем уравнения Шрёдингера для каждой зоны

$$\psi'' + \frac{2m(E-U_1)}{\hbar^2}\psi = 0$$

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

$$\psi'' + \frac{2m(E-U_2)}{\hbar^2}\psi = 0$$

Поскольку мы рассматриваем случай $E < U$ (случай подбарьерного перехода), введем обозначения для коэффициентов k

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m(E-U_1)}}{\hbar}$$

$$k = i\alpha = \frac{\sqrt{2m(E-U)}}{\hbar}$$

$$k2 = \frac{\sqrt{2m(E-U_2)}}{\hbar}$$

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

Рассматривая прохождение потенциального барьера конечной ширины l рис 2, обозначим r_1, d_1 – амплитудные коэффициенты на первой границе, r_2, d_2 – амплитудные коэффициенты на второй границе. При распространении волны в обратном направлении, соответственно r_1', d_1', r_2', d_2'. За r и d обозначим амплитудные коэффициенты при прохождении всего барьера. Тогда, рассматривая волны на правой и левой границе, получим

$$r = r_1 + d_1 b \quad a = d_1 + r_1' b$$

$$de^{ik_2 l} = d_2 a e^{ikl} \quad be^{-ikl} = r_2 a e^{ikl}$$

Решая эту систему, и учитывая соотношения (12) получим выражения для амплитудных коэффицинтов

$$r = \frac{r_1 + r_2 e^{2ikl}}{1 + r_1 r_2 e^{2ikl}} \quad d = \frac{d_1 d_2 e^{-i(k_2 - k)l}}{1 + r_1 r_2 e^{2ikl}} \tag{14}$$

Подставляя

$$r_1 = \frac{k_1 - k}{k_1 + k} \quad d_1 = \frac{2k_1}{k_1 + k} \tag{15}$$

$$r_2 = \frac{k - k_2}{k + k_2} \quad d_2 = \frac{2k}{k + k_2} \tag{16}$$

а так же используя выражение

$$D = \frac{k_2}{k_1}|d|^2 = \frac{k_2}{k_1} dd^*$$

получим формулу для коэффициента подбарьерного перехода

$$D = \frac{16 k_1 k_2 \alpha^2}{(k_1^2 + \alpha^2)(k_2^2 + \alpha^2)(e^{2\alpha l} + e^{-2\alpha l}) + 2(\alpha^2 - k_1 k_2)} \tag{17}$$

Итак, мы получили общее выражение для подбарьерного перехода. В рамках нашей численной задачи, мы будем рассматривать частный случай, при котором $U_1 = U_2 = 0$, $U = U_0$, тогда выражение для D можно легко переписать в терминах энергий

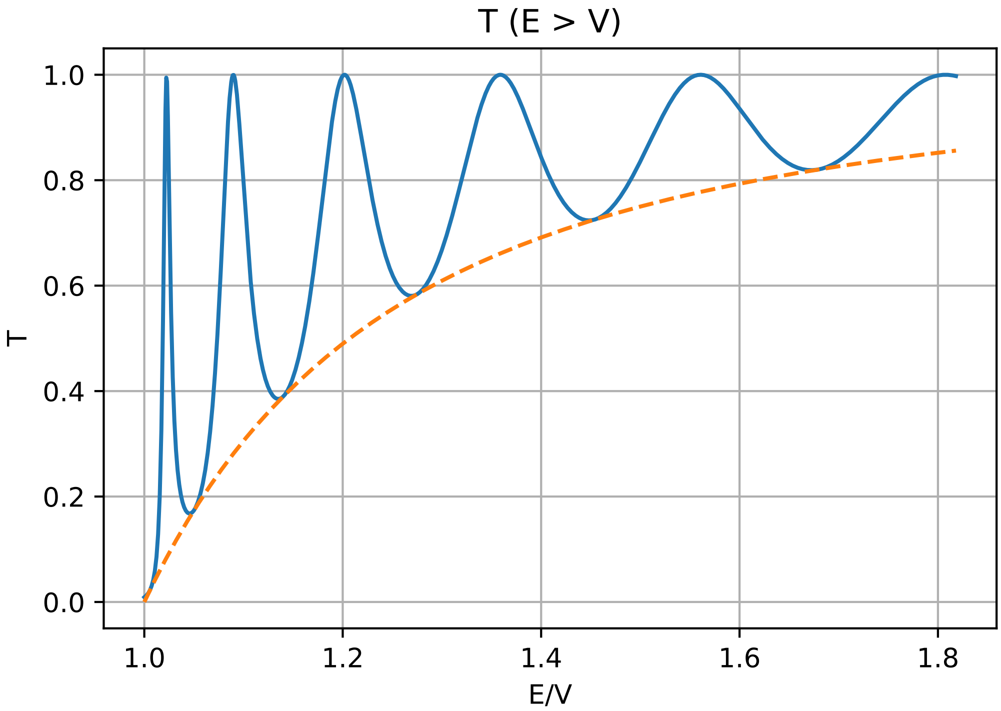

Рис. 3: Коэффициент надбарьерного перехода

$$D = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \sinh^2 kl} \tag{18}$$

где $k = \dfrac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}$. Именно это выражение мы будем использовать в качестве результата теоретического расчета при исследовании численного решения.

Проводя аналогичные рассуждения для ситуации, в которой $E > U$ (надбарьерный переход), для коэффициента прохождения получим следующее выражение

$$D = \frac{1}{1 + \frac{U_0^2}{4E(U_0 - E)} \sin^2 kl} \tag{19}$$

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

Довольно интересным оказывается рассмотреть зависимости коэффициентов надбарьерного и подбарьерного перехода в зависимости от энергии E.

Рассматривая графики 3 и 4 можно заметить следующие закономерности:

1. Коэффициент надбарьерного перехода не возрастает строго, а осцилирует. Это возникает в силу наличия синуса в знаменателе. Это значит, что частица с более высокой энергией не обязательно имеет большую вероятность преодоления барьера.

2. Коэффициент подбарьерного перехода монотонно возрастает с увеличением энергии. Это значит, что чем больше энергия частицы, тем больше вероятность ее проскочить под барьером.

Данные утверждения мы в дальнейшем проверим визуально.

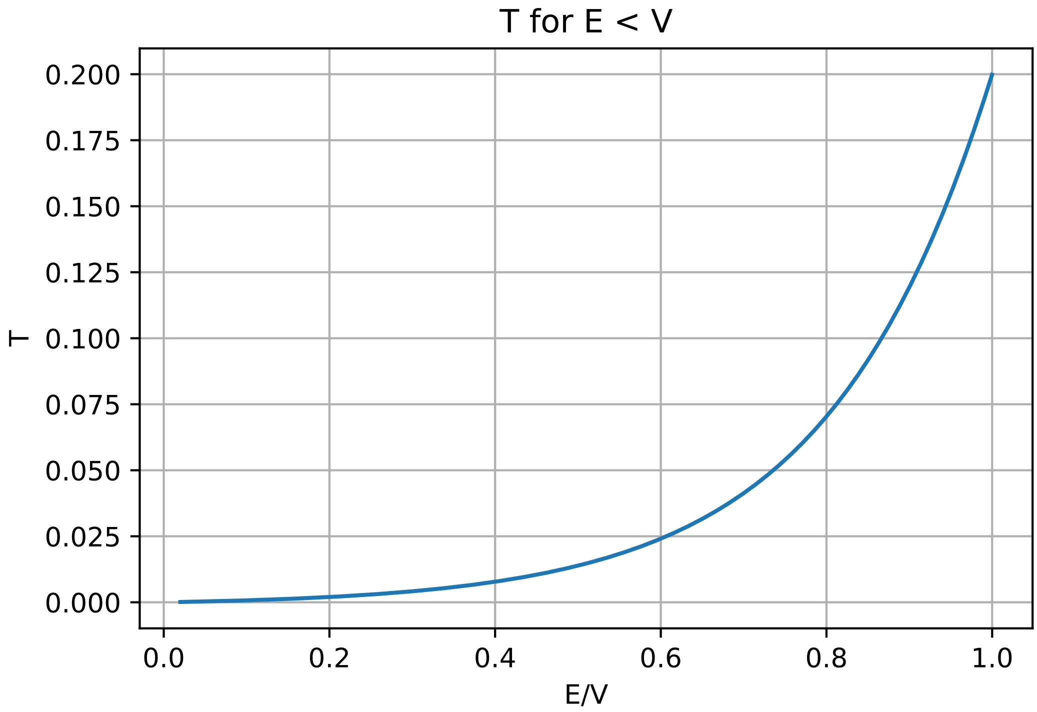

Рис. 4: Коэффициент подбарьерного перехода

4 Численное решение уравнения Шрёдингера и создание визуализации

4.1 Численное решение

Запишем уравнение Шрёдингера, зависящее от времени

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \hat{H}\psi(r,t) \tag{20}$$

где $\hat{H}$ – в данном случае оператор полной энергии (гамильтониан). Запишем этот оператор

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(r) \tag{21}$$

где Δ – оператор Лапласа. Решение полученного дифференциального уравнения записывается следующим образом

$$\psi(r,t) = \exp(-iHt)\psi(r,0) \tag{22}$$

Перейдем к обсуждению численного решения. Пространственный интервал поделим сеткой на N частей. В каждый отдельный момент времени волновая функция будет представлять собой N-мерный вектор значений функции в узлах сетки. Таким образом, получая с помощью (22) значение волновой функции в каждый следующий момент времени мы в итоге сможем наблюдать, изменение и движение волновой функции.

Поскольку мы будем рассматривать одномерное движение, гамильтониан можно переписать в следующем виде.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \tag{23}$$

Таким образом задача численного решения свелась к необходимости получить оператор H, из которого в последствии можно будет получить оператор $\exp(-iHt)$.

Для вычисления второй производной воспользуемся формулой

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}_{x=j\Delta x} = \frac{\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}}{dx^2} \tag{24}$$

В данном случа под dx понимается не бесконечно малое значение, как в математическом анализе, а Δx – период пространственной сетки.

Тогда, если ψ представляет собой вектор дискретных значений

$$\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \dots \\ \psi_N \end{pmatrix} \tag{25}$$

То вектор значений вторых производных этой функции в узлах построенной сетки можно получить с помощью трехдиагональной матрицы

$$\begin{pmatrix} \psi_1'' \\ \psi_2'' \\ \dots \\ \psi_N'' \end{pmatrix} = \frac{1}{dx^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ & & & \dots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \dots \\ \psi_N \end{pmatrix} \tag{26}$$

Значение потенциальной энергии U так же можно представить в виде вектора значений в узлах сетки. Тогда действие оператора H на вектор значений волновой функции ψ можно представить, как умножение вектора значений волновой функции на матрицу

$$H = -\frac{\hbar^2}{2mdx^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ & & & \dots & & & \\ 0 & 0 & 0 & & \dots & -2 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & V_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ & & & \dots & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & V_N \end{pmatrix} \tag{27}$$

Мы получили вид оператора полной энергии для N-мерного вектора значений волновой функции. Далее, получив с помощью встроенных математический функций оператор $\exp(-iHt)$, по значению волновой функции в некоторый момент времени $\psi(r,t)$ мы сможем с помощью (22) получить значение волновой функции в узлах сетки в момент времени $t + dt$.

Результат работы мы можем видеть на рисунках 5, 6 и 7. Изменение положения волновой функции со временем мы можем видеть на рисунках 8, 9.

4.2 Средний импульс и средняя координата

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

$$\langle f \rangle = \int \psi^* \hat{f} \psi dV \tag{28}$$

Заметим, что в данном случае в левой части равенства f – некоторая функция, а в правой части равенства $\hat{f}$ – **оператор**. Вспомним, что оператор импульса имеет выражение

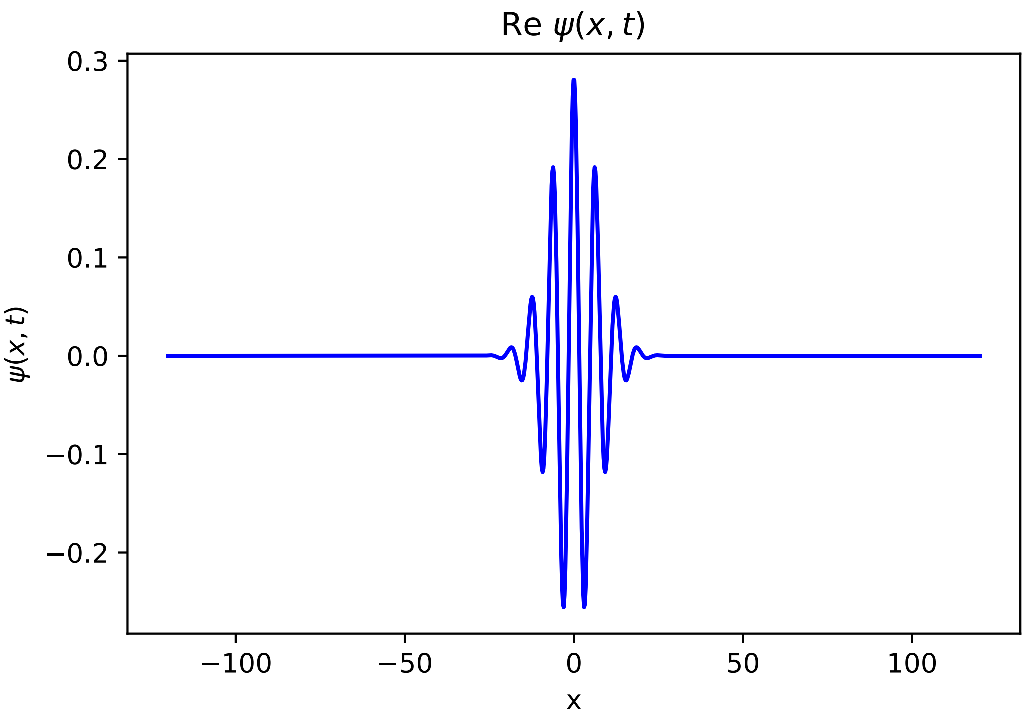

Рис. 5: Волновая функция. Действительная часть

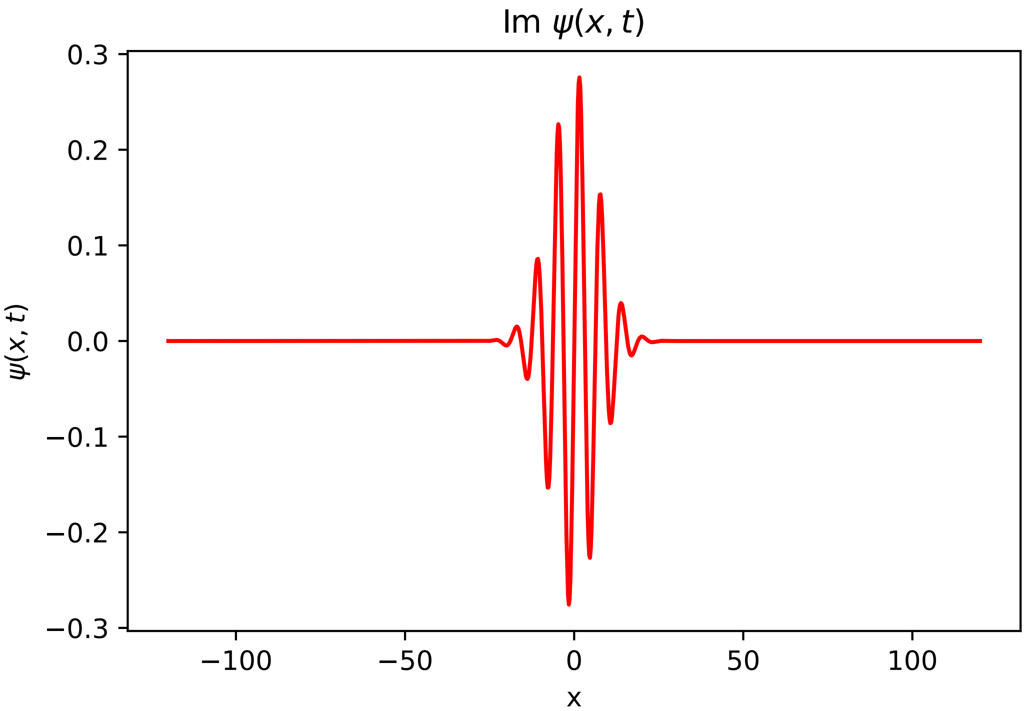

Рис. 6: Волновая функция. Мнимая часть

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \tag{29}$$

Тогда мы сможем находить находить значения средней координаты и среднего импульса динамически

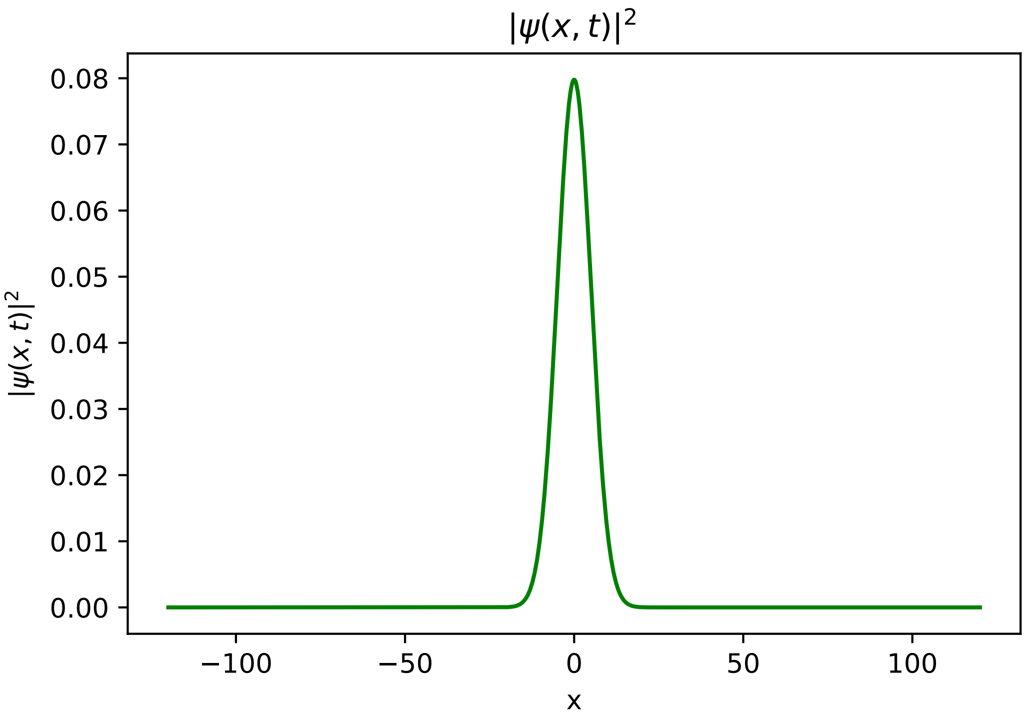

Рис. 7: Модуль квадрата волновой функции

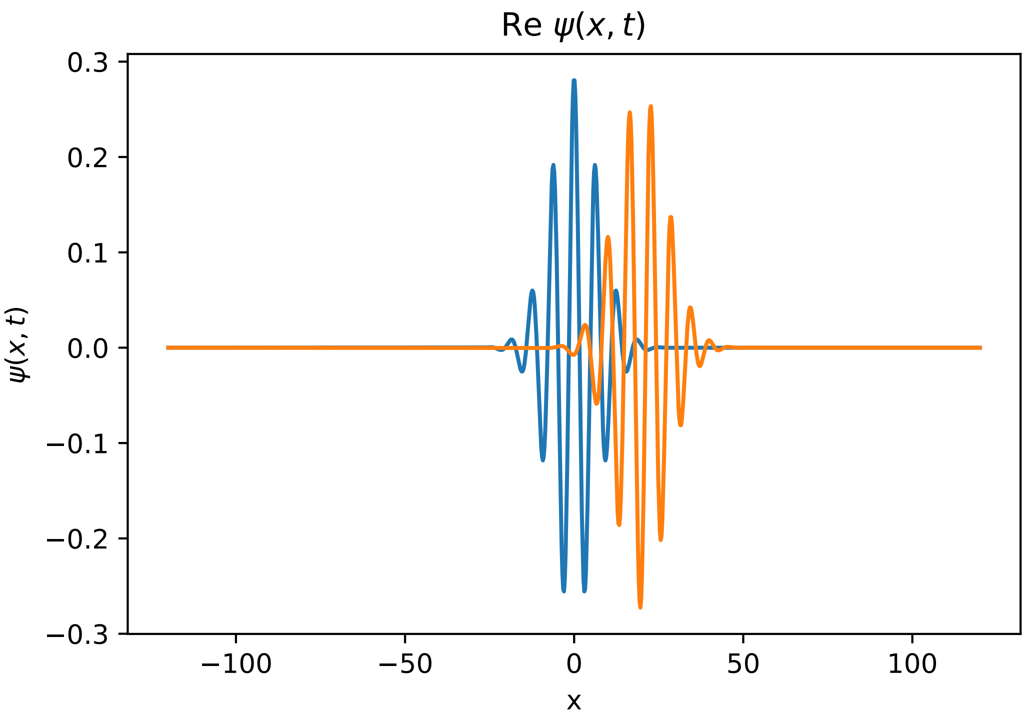

Рис. 8: Изменение положения волновой функции

$$\langle x\rangle = \int \psi^* x \psi dx \tag{30}$$

$$\langle p\rangle = \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx \tag{31}$$

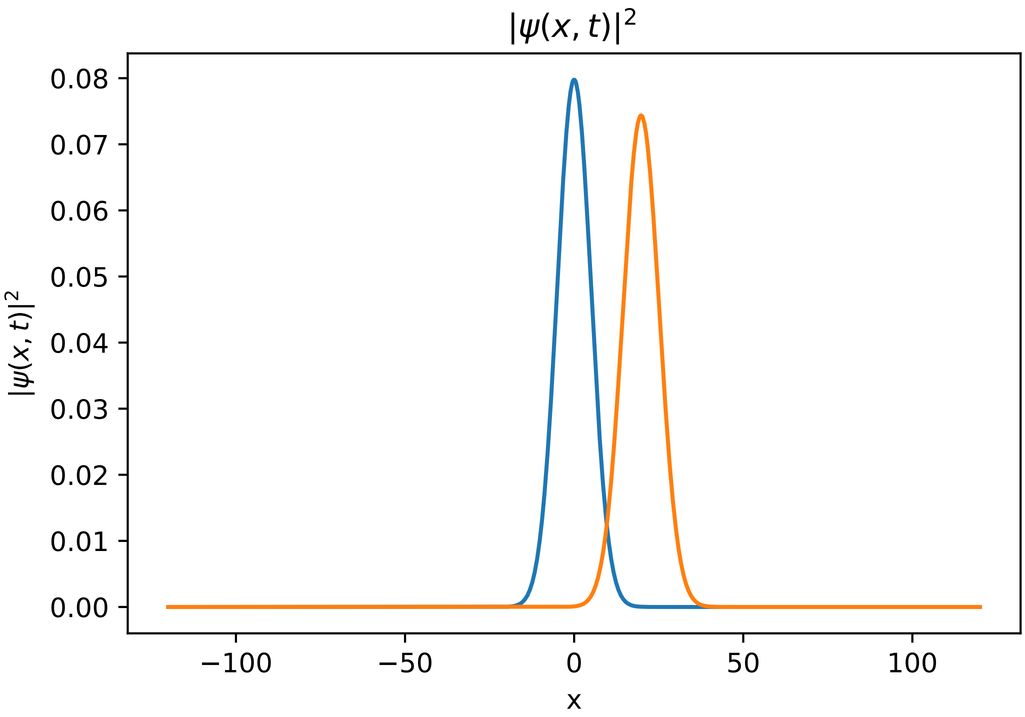

Рис. 9: Изменение положения волновой функции

4.3 Волновая функция $\psi(x, 0)$

Как видно из (22), для того, чтобы построить решение, необходимо задать функцию $\psi(r, 0)$. То есть, задать волновую функцию в пространстве в начальный момент времени.

Решением стационарного уравнения Шрёдингера в общем случае является функция

$$\psi(r) = \psi_0 \exp \frac{i\vec{p}\vec{r}}{\hbar} \tag{32}$$

В одномерном случае это выражение запишется в несколько упрощенном виде

$$\psi(r) = \psi_0 e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

где $p = \sqrt{2mE}$.

В программе в качестве начального решения будем задавать волновую функцию следующего вида

$$\psi(x) = \left(\frac{1}{\pi\sigma_0^2}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(ip_0 x - \frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_0^2}\right) \tag{33}$$

где p_0 – начальный импульс, x_0 – начальная координата, σ_0 – неопределенность координаты (учет соотношения неопределенности).

При этом ширина σ не остается постоянной. Имеет место **расплывание** ширины σ по следующему закону

$$\sigma(t) = \sigma_0 \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{m\sigma_0^2}\right)^2} \tag{34}$$

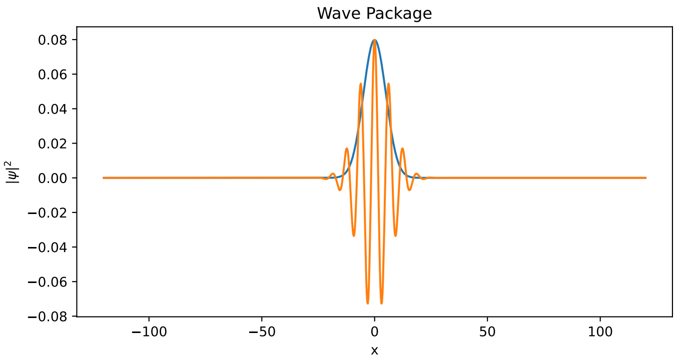

Рис. 10: Волновая функция в отсутствии препятствий

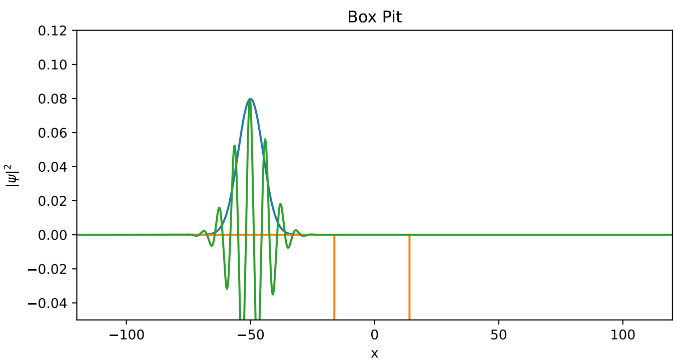

Рис. 11: Прямоугольная потенциальная яма

5 Краткое описание моделей

5.1 Волновая функция в отсутствии препятствий

На примере этой модели (рис 10) мы рассматриваем волновую функцию в отсутствии потенциальных барьеров. То есть эта ситуация по-сути демонстрирует свободное равномерное прямолинейное движение квантовой частицы.

Наиболее хорошо на примере этой модели можно пронаблюдать увеличение ширины σ с течением времени. Особо стоит обратить внимание на то, что чем меньше начальная ширина, тем быстрее она возрастает.

5.2 Прямоугольная потенциальная яма

Классическая задача, рассматриваемая в курсе физики рис 11. Прохождение волновой функции через потенциальню яму. На примере этой модели можно рассмотреть отражение и прохождение волны на границах областей.

5.3 Параболическая потенциальная яма

Модель демонстрирует осциляцию волновой функции внутри параболической потенциальной ямы $U = \dfrac{ax^2}{2}$ рис 12.

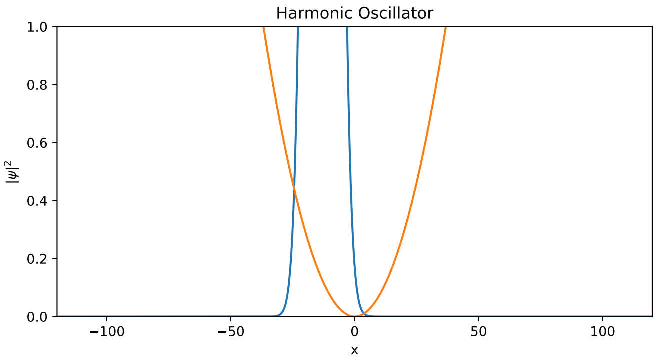

Рис. 12: Параболическая потенциальная яма

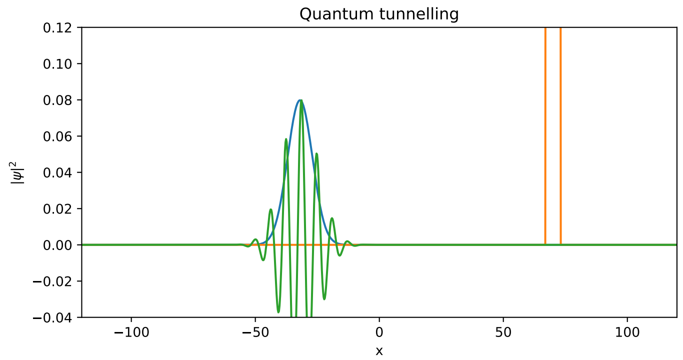

Рис. 13: Прямоугольный потенциальный барьер конечной ширины

5.4 Прямоугольный потенциальный барьер конечной ширины

Основная задача данной работы рис 13. На примере модели можно рассматривать надбарьерное прохождение а так же эффект квантового туннелирования. Кроме того, на примере данной можели можно наблюдать изменение коэффициента прохождения в зависимости от энергии E в случае надбарьерного и подбарьерного перехода, а так же в зависимости от различных параметров.

5.5 Равномерно возрастающий потенциал

Модель демонстрирует поведение волновой функции при равномерном возрастании потенциальной энергии $U(x) = kx$ рис 14.

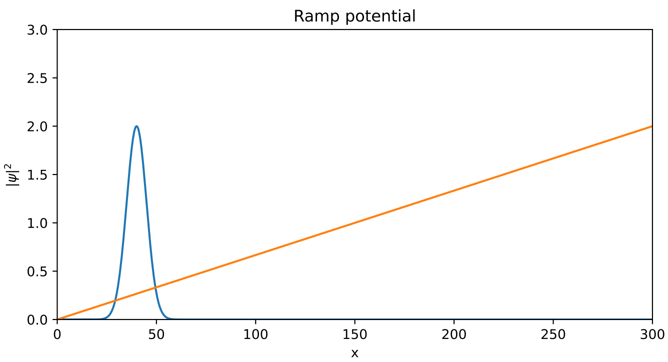

Рис. 14: Равномерно возрастающий потенциал

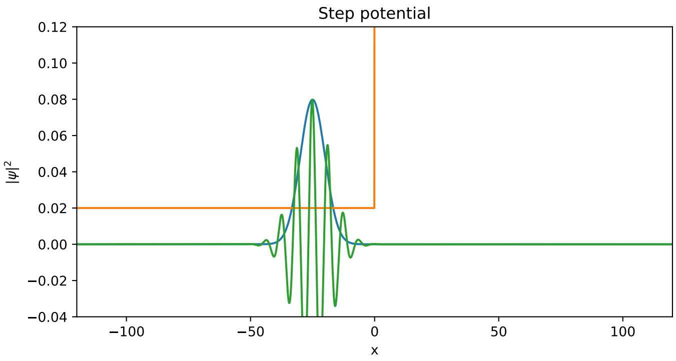

Рис. 15: Прямоугольный потенциальный барьер

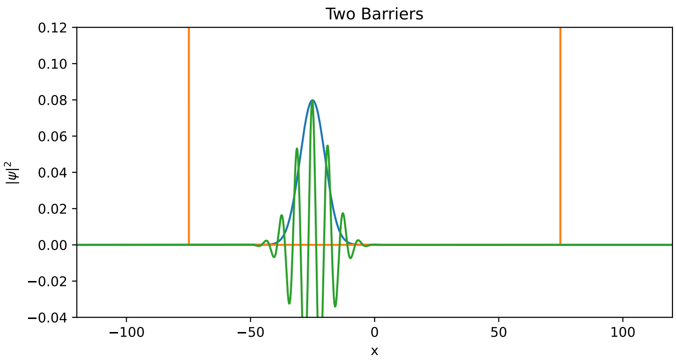

Рис. 16: Бесконечно глубокая потенциальная яма

5.6 Прямоугольный потенциальный барьер

На примере модели рассматривается проникание волновой функции под потенцильный барьер и ее экспоненциальное затухание рис 15.

5.7 Бесконечно глубокая потенциальная яма

Классическая задача, рассматриваемая в курсе физики – поведение волновой функции в потенциальной яме с бесконечно высокими стенками 16.

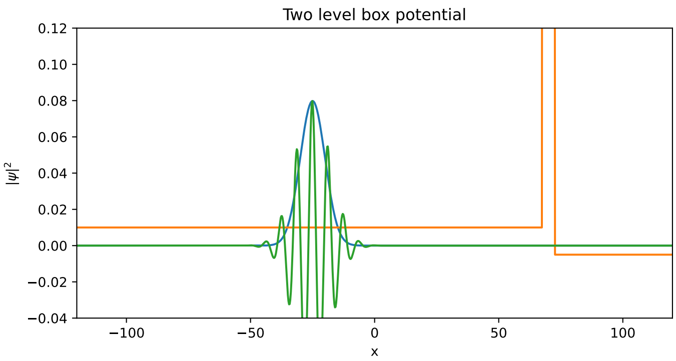

Рис. 17: Общий случай прямоугольного потенциального барьера

5.8 Общий случай прямоугольного потенциального барьера

Чуть более общий случай ситуации, рассмотренной на рис 13 представлен на рис 17. В данной модели помимо всего прочего значения потенциалов в первой и третьей областях не равны.

6 Вывод

Основной целью данно работы являлось теоретическое рассмотрение физических явлений, а так же визуальное наблюдение теоретических зависимостей на примере созданных качественных моделей. В данной работе при рассмотрении визуальных моделей мы пронаблюдали следующее:

1. Зависимость ширины волновой функции σ от времени.
2. Проникание волновой функции под потенциальный барьер.
3. Надбарьерный переход.
4. Подбарьерный переход (квантовое туннелирование).
5. Зависимость коэффициента подбарьерного перехода от энергии E.
6. Осцилирующий характер коэффициента надбарьерного перехода в зависимости от энергии E.
7. Зависимость коэффициента перехода от энергии квантовой частицы E, высоты потенциального барьера U и ширины потенциального барьера a.