دانشگاه صنعتی اصفهان

گزارش پروژه مکانیک کوانتومی(۱)

شبیه‌سازی تحول بسته‌ی موج گوسی در طول زمان

استاد: مهدی عبدی

نگارنده: زینب صادقیان

شماره دانشجویی: ۹۵۲۹۳۶۳

فهرست مطالب

۱. مقدمه

هدف این گزارش بررسی تحولات بسته‌ی موج[۱] در طول زمان در یک بعد با استفاده از معادله شرودینگر[۲] وابسته به زمان یک-بعدی است. فرم کلی معادله شرودینگر وابسته به زمان در سه بعد به صورت زیر می‌باشد:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(\vec{r},t\right) = H\,\Psi\left(\vec{r},t\right)$$

که در آن H عملگر هامیلتونی است که انرژی کل به ازای هر تابع موج داده شده را مشخص می‌کند، $\Psi(\vec{r},t)$ حالت سیستم کوانتومی، i واحد موهومی، $\hbar$ ثابت کاهیده پلانک و t زمان می‌باشد. این معادله تحول سیستم در طول زمان را توصیف می‌کند و پاسخ آن معادله موج وابسته به زمان است. مشهورترین شکل این معادله، معادله‌ی شرودینگر غیر نسبیتی برای حالتی از سیستم است که با تابع موج ($\Psi(\vec{r},t)$) توصیف می‌شود و در پتانسیل ($U(\vec{r},t)$) قرار گرفته است. در این حالت هامیلتونی به شکل زیر توصیف می‌شود:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)+U\left(\vec{r},t\right) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+U\left(\vec{r},t\right)$$

معادله ۲. ۱

برای حل این معادله می‌توان آن را به یک معادله‌ی ویژه مقداری[۳] که معادله شرودینگر مستقل از زمان نام دارد، کاهش داد:

$$H\,\psi\left(\vec{r}\right) = E\,\psi\left(\vec{r}\right)$$

در این معادله E انرژی کل سیستم را مشخص را می‌کند. با حل این معادله ($\Psi(r)$) به دست می‌آید و می‌توان تحول زمانی و تغییرات آن را با زمان را به صورت روبه‌رو نوشت: $\Psi\left(\vec{r},t\right)=\psi\left(\vec{r}\right)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$.

در نهایت می‌توان معادله شرودینگر وابسته به زمان برای یک ذره در یک بعد را به صورت زیر نوشت:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+U(x,t)\Psi(x,t)$$

در شبیه‌سازی انجام شده معادله شرودینگر وابسته به زمان به استفاده از الگوریتمی به نام FDTD که به صورت مفصل در بخش (۲) بررسی شده است به صورت عددی حل می‌گردد. به طور خلاصه این الگوریتم تقریبی برای مشتق سای نسبت به زمان و تقریبی برای مشتق دوم سای نسبت به مکان که هر دو برای حل معادله شرودینگر ضروری‌اند به دست می‌آورد و این معادله را حل می‌کند.

---

[۱] wave packet
[۲] Schrodinger equation
[۳] Eigenvalue equation

در ادامه‌ی این گزارش ابتدا روش FDTD معرفی می‌گردد، سپس بسته موج با توزیع گوسی[1] توصیف و بررسی می‌شود، سپس حل معادله‌ی شرودینگر برای یک سای کلی که در پتانسیل‌های ساده ای قرار گرفته است و خروجی و نتایج آن بررسی می‌شود، در نهایت بسته‌ی موج گوسی قرار گرفته در این پتانسیل‌ها و خروجی معادله شرودینگر برای آن بررسی و نتایج و علل شبیه سازی مشاهده می‌گردد.

[1] Gaussian

۲.Finite-difference time-domain (FDTD)

الگوریتم FDTD به علت سادگی و قابل فهم بودن، ابزار بسیار محبوبی برا شبیه سازی است. کار اصلی که این الگوریتم انجام می‌دهد آن است که معادلاتی که در آن مشتقاتی وجود دارد ورودی می‌گیرد و تمام مشتقات آن را با دیفرانسیل‌های متناهی تقریب می‌زند. سپس سیستم با گام‌های زمانی کوچک پیش می‌رود و پاسخ معادله در طول زمان مشخص می‌گردد. در حقیقت هر سیستم فیزیکی که با معادله دیفرانسیل قسمی[۱] (PDE) وابسته به زمان توصیف می‌گردد می‌تواند با FDTD شبیه‌سازی گردد. معادله موج را می‌توان ترکیبی از دو بخش حقیقی و موهومی دانست لذا خواهیم داشت:

$$\Psi(x,t) = \Psi_R(x,t) + i\,\Psi_I(x,t)$$

با قرار دادن این تابع موج در معادله شرودینگر به شکل بیان شده در بالا دو معادله به شکل زیر خواهیم داشت:

$$\frac{\partial \Psi_R(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_I(x,t)}{\partial x^2} + \frac{1}{\hbar}U(x,t)\Psi_I(x,t)$$

$$\frac{\partial \Psi_I(x,t)}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi_R(x,t)}{\partial x^2} - \frac{1}{\hbar}U(x,t)\Psi_R(x,t)$$

اولین قدم برای اعمال این الگوریتم تعریف یک شبکه[۲] است، این شبکه مجموعه‌ای از نقاط گسسته در زمان و مکان می‌باشد که توابع ما را نمونه‌برداری می‌کند. اگر نقطه‌ی زمانی با فاصله‌ی زمانی Δt و هر نقطه‌ی مکانی با فاصله‌ی مکانی Δx جدا شده باشند آن‌گاه نقاط شبکه به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\begin{aligned} x_\ell &= \ell\Delta x \\ t_n &= n\Delta t \end{aligned}$$

که $۰ \le n \le N$ و $۰ \le l \le L$. در این شبکه تابع موج را می‌توان به صورت روبه رو در شبکه نمونه برداری کنند:

$$\psi(x_\ell, t_n) = \psi^n(\ell)$$

حال باید مشتقات را با استفاده از دیفرانسیل متناهی تخمین زد. برای سادگی قسمت موهومی تابع به گونه‌ای تعریف شده است که در فاصله‌ی نیم گامی از قسمت حقیقی باشد. این کار کمک می‌کند که بتوان از روش دیفرانسیل مرکزی[۳] که روش دقیق تری نسبت به روش پیش رو[۴] و بازگشت[۵] است، استفاده کرد. تقریبات مذکور به صورت زیر هستند:

برای قسمت حقیقی:

$$\frac{\partial \psi_R(x_\ell, t_{n+1/2})}{\partial t} \approx \frac{\psi_R^{n+1}(\ell) - \psi_R^n(\ell)}{\Delta t}\ .$$

---

[۱] Partial differential equation
[۲] mesh
[۳] Central-difference
[۴] forward
[۵] backward

برای قسمت موهومی:

$$\frac{\partial\psi_I(x_\ell,t_n)}{\partial t}\approx\frac{\psi_I^{n+1/2}(\ell)-\psi_I^{n-1/2}(\ell)}{\Delta t}\ .$$

و برای مشتقات درجه دوم:

$$\frac{\partial^2\psi_R(x_\ell,t_n)}{\partial x^2}\approx\frac{\psi_R^n(\ell+1)-2\psi_R^n(\ell)+\psi_R^n(\ell-1)}{\Delta x^2}$$

. معادله تقریبی مشتق درجه دوم

در نهایت با قرار دادن تمامی این مقادیر تعریف شده در معادله شرودینگر و با در نظر داشتن اینکه برای قسمت حقیقی گام زمانی حول (t= (n+ ۱/۲)Δt) و برای قسمت حقیقی گام زمانی حول (t= nΔt) می‌باشد، به معادلات زیر خواهیم رسید:

$$\psi_I^{n+1/2}(\ell) \;=\; +c_1\left[\psi_R^n(\ell+1)-2\psi_R^n(\ell)+\psi_R^n(\ell-1)\right]-c_2V(\ell)\psi_R^n(\ell)+\psi_I^{n-1/2}(\ell)$$

$$\psi_R^{n+1}(\ell) \;=\; -c_1\left[\psi_I^{n+1/2}(\ell+1)-2\psi_I^{n+1/2}(\ell)+\psi_I^{n+1/2}(\ell-1)\right]+c_2V(\ell)\psi_I^{n+1/2}(\ell)+\psi_R^n(\ell)$$

در روابط بالا $V(\ell)$ همان تابع پتانسیل است و ضرایب هر کدام $c_1 = \frac{\hbar\Delta t}{2m\Delta x^2}$ و $c_2 = \frac{\Delta t}{\hbar}$ می‌باشند. لازم به ذکر است که مشتق درجه دوم تابع موج در نقاط مرزی طبق معادله تقریبی مشتق درجه دوم تعریف نمی‌شود، کار ساده این است که تابع موج در این نقاط را صفر در نظر بگیریم. این کار باعث مشکلاتی از قبیل بازتاب در نقاط مرزی می‌شود، در نتیجه شبیه سازی باید قبل از رسید تابع موج به این نقاط پایان پذیرد. این الگوریتم بر گام‌های زمانی نیمه پیش می‌رود و معادله قسمت موهومی حل می‌شود، سپس معادله قسمت حقیقی حل می‌شود. با رسیدن n به N الگوریتم پایان می‌پذیرد و خروجی نهایی شبیه سازی پیشرفت زمانی تابع موج در دامنه زمانی و مکانی گسسته است. از آنجایی که برای پتانسیل‌های ساده پاشخ معادله شرودینگر تابع موجی است از قسمت‌های سینوسی و کسینوسی تشکیل شده است و همان طور که می‌دانیم توابع سینوس کسینوسی حداکثر ۱ و حداقل -۱ هستند، کمان این توابع تابعی از Δt و Δx هستند. پس محدودیتی برای Δt بر حسب Δx و ۷۰ و ħ به دست می‌آید. در حقیقت به منظور داشتم یک شبیه سازی پایدار برای اختلاف زمانی یک حداکثری وجود داشت خواهد داشت:

$$\Delta t\leq\frac{\hbar}{\frac{\hbar^2}{m\Delta x^2}+\frac{V_0}{2}}$$

در نهایت شایان ذکر است زبان برنامه‌نویسی انتخاب شده برای پیاده سازی این الگوریتم پایتون و این شبیه سازی با بهره گیری از کتابخانه‌های پایتون برای ساخت انیمیشن و محاسبات مختلف استفاده گردیده است.

۳.Gaussian wave packet

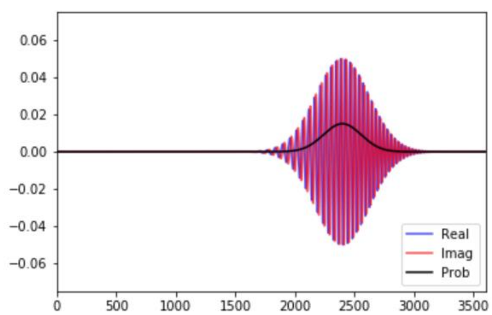
در فیزیک ، یک بسته موج (یا قطار موج) یک "پاکت" کوتاه از عمل موج موضعی است که به عنوان واحد حرکت می کند. با درنظر گرفتن مدل تک بعدی یک ذره‌ی آزاد ($V(x) = ۰$) که تابع موج آن در لحظه ۰ به صورت زیر است:

$$\psi(x,0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} \; e^{ikx} \, dk$$

این تابع موج از برهم نهی موج‌های ساده e^{ikx} با ضرایب مشخص زیر می‌شود:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} g(k,0) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \; e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2}$$

همانطور که مشاهده می‌شود این ضرایب فرم تابع گوسی با مرکزیت $k_۰$ دارند (با یک ضریب عددی به منظور نرمال سازی تابع موج). به همین علت این نوع بسته موجی، بسته موج گوسی نامیده می‌شود.



با انجام کمی محاسبات و با قرار دادن $p_۰/\hbar$ به جای $k_۰$، $۲\sigma^۲$ به جای $a^۲$ ، می‌توان تابع موج در لحظه صفر را به صورت زیر نوشت:

$$\psi(x;0) = \frac{A}{\sqrt{\sigma}} e^{-x^2/2\sigma^2} e^{i(p_0/\hbar)x}$$

$$A = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}}.$$

برای این تابع موج می‌توان عدم قطعیت که از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید را محاسبه نمود:

$$(\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2$$

$$\langle \hat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x|\psi(x;0)|^2 \, dx = \frac{A^2}{\sigma} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-x^2/\sigma^2} \, dx = 0$$

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2|\psi(x;0)|^2 \, dx = A^2\sigma^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sigma^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} = \frac{\sigma^2}{2}.$$

در نتیجه:

$$(\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle,$$

و نهایتا:

$$\Delta x = \sigma/\sqrt{2}.$$

Δx در اینجا میزان پهن شدگی بسته موج را مشخص می‌کند.

---

۴. حل معادله‌ی شرودینگر برای بسته موج گوسی در پتانسیل‌های مختلف

در این بخش معادله‌ی شرودینگر در پتانسیل‌های ساده برای تابع موج دلخواه حل می‌شود و پاسخ آن از لحاظ تئوری مورد بحث قرار می‌گیرد سپس تابع موج را برابر بسته موج گوسی قرار داده می‌شود و شبیه سازی انجام شده برای آن را نشان داده می‌شود. سپس برای هر شکل از شبیه سازی علل رفتار بسته موج بررسی می‌گردد.

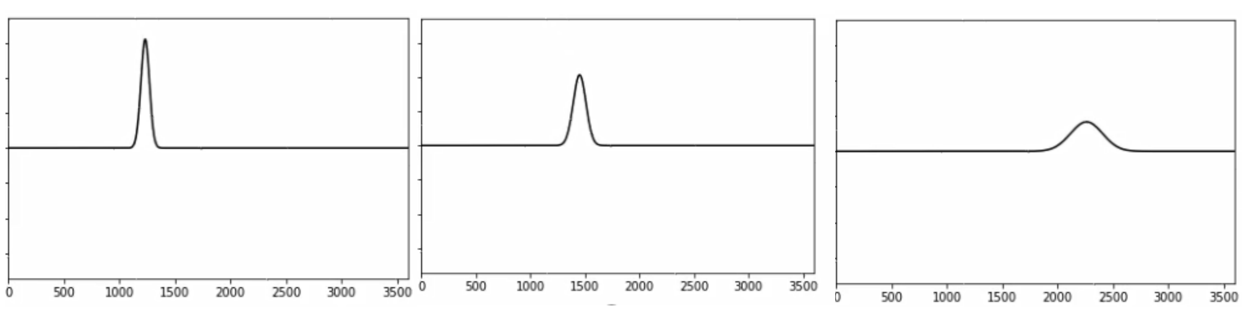
۴. ۱ ذره‌ی آزاد

برای یک ذره که در راستای محور x تحت عنوان ذره آزاد حرکت می‌کند با انرژی کل E و پتانسیل صفر ، $U(x) = ۰$، معادله وابسته به زمان شرودینگر برای این ذره به صورت زیر خواهد بود:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial}{\partial x^2}\Psi(x,t)$$

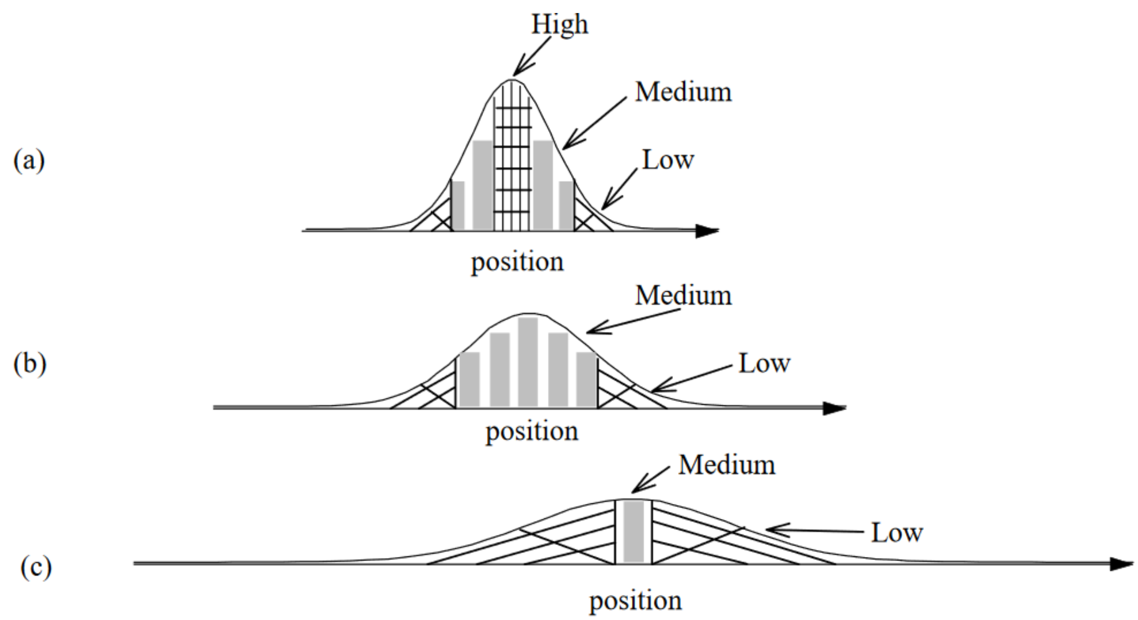
پاسخ کلی این معادله به صورت $\psi(x) = Ae^{\pm i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x}$ $\Psi(x,t) = \psi(x)e^{-i\frac{Et}{\hbar}} = Ae^{\pm i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x}e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$ خواهد بود.

E انرژی کل، انرژی جنبشی $K = \frac{1}{2}mv^2 = E$، سرعت ذره $v_{particle} = \sqrt{\frac{2E}{m}}$، تکانه $p = mv = \hbar k = \sqrt{2mE}$ ، عدد موج $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ و طول موج $\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$ است. این پاسخ را می‌توان به صورت موج‌های تخت $\Psi(x,t) = Ae^{i(\pm kx - \omega t)}$ که در آن علامت مثبت برای k نشان‌دهنده حرکت ذره به سمت راست و جهت مثبت مور xها و علامت منفی آن نشان دهنده حرکت ذره در جهت منفی محور xها است. در شکل زیر نتیجه شبیه‌سازی را برای یک بسته موج گوسی مشاهده می‌کنیم:



t = ۰۰:۰۳,۷۸   t = 00:06.00   t = 00:14.00

همانطور که مشاهده می‌شود بسته موج در طول زمان گسترده تر می‌شود و احتمال حضور آن رنج بیشتری را در بر می‌گیرد. تابع موج گوسی از تعدادی تابع موج با طول موج‌های متفاوتی تشکیل شده است. طبق رابطه‌ای که برای طول موج نوشته شد مشاهده شد که طول موج با تکانه ارتباط دارد. این تابع موج اطلاعاتی از هم مکان و هم تکانه را در بر دارد و برای هر کدام عدم قطعیتی خواهد داشت. می‌توان گفت در ابتدای شروع شبیه‌سازی تابع موجی داریم که مشخص می‌کند ذره در کدام نقاط می‌تواند باشد از طرفی ذره در هر نقطه‌ای که قرار داشته باشد رنجی از تکانه را می‌تواند داشته باشد و دقیق مشخص نیست که با چه سرعتی حرکت می‌کند (عدم قطعیت در تکانه). برای دانستن مکان دقیق یک ذره باید مکان اولیه و سرعت حرکت آن کاملا مشخص باشد. حال آنکه برای یک نقطه تکانه‌های متفاوت می‌تواند وجود داشته باشد پس ذره در لحظه بعد می‌تواند در رنج مکانی مختلفی باشد. تابع موج خود دلتا ایکسی دارد که مشخص می‌کند در لحظه شروع ذره می‌تواند در رنج مختلفی از مکان حضور داشته باشد و نقاط مختلفی را مشخص می‌کند که در زمان های بعد ه کدام از این نقاط رنج مختلفی را ایجاد می‌کنند. این مانند این است که تابع موج و دلتا ایکس بیشتر شود. در حقیقت عدم قطعیت در مکان با گذشت زمان بیشتر می‌شود و می توان گفت ذره با گذر زمان در هر نقطه ای با احتمال مساوی می تواند یافت شود. نشان خواهیم داد که اگر در لحظه شروع دلتا ایکس کمتری داشته باشد به این معنا که دقیق تر بدانیم کجا قرار دارد سریع تر از هم باز می‌شود و تغییرات دلتا ایک آن بیشتر خواهد بود. در حقیقت می توان گفت که هرچه بیشتر در زمان شروع از مکان ذره اطلاعات داشته باشیم، کمتر ذره را در زمان های بعد می‌شناسیم و از آن اطلاعات داریم.



هر چه زمان بگذرد مکان هایی که احتمال بیشتری برای حضور ذره در آن ها وجود داشت احتمال کمتری پیدا می‌کنند و مکان هایی با احتمال متوسط یا کمتر بزرگ تر می‌شوند.

اگر تابع موج ذره آزاد را در زمان ۰ به صورت:

$$\Psi(x,0) \;=\; \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} e^{-ax^2}$$

در نظر بگیریم، آنگاه طبق محاسباتی که انجام داده می‌شو برای حل معادله ویژه مقداری (پیدا کردن پاسخ معادله، بسط سای بر اساس پاشخ های آن و محاسبه تحول زمانی آن) می توان گفت همان عملیات تبدیل فوریه انجام شده است. لذا می توان تابع موج را به صورت زیر نوشت:

$$\Psi(x,0) \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\; \Phi(k,0)\, e^{ikx}$$

با ضرایب:

$$\begin{aligned}\phi(k) \;\equiv\; \Phi(k,0) \quad &= \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\; \Psi(x,0)\, e^{-ikx} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} dx\; e^{-ikx}\, e^{-ax^2} \;=\; \left(\frac{1}{2\pi a}\right)^{1/4} e^{-\frac{k^2}{4a}}\end{aligned}$$

که نشان می دهد تابع موج گوسی مکانی *superposition*ای از تکانه های مختلف است با احتمال پیدا کردن تکانه بین *k1* و *k1 + dk* به اندازه‌ی $exp(-k1^{۲}/(۲\, a))dk$. تابع ابتدایی نیز از تعدادی موج تخت با ضرایب مختلف تشکیل شده بود. از آن جایی که برای هر *k* حقیقی *exp ikx* مقدار ویژه هامیلتون با ویژه مقدار زیر است:

$$\boxed{E_k \;=\; \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$

پس *exp(ikx)* با $exp(-iE_k t/\hbar)$ تغییر می کند. پس می‌توان نوشت:

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) \quad &= \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\; \phi(k)\, e^{ikx}\, e^{-iE_k t/\hbar} \\ &= \quad \left(\frac{1}{2\pi a}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}}\; e^{-\frac{k^2}{4a}}\, e^{-iE_k t/\hbar}\, e^{ikx}\end{aligned}$$

با در نظر گرفتن:

$$-\frac{k^2}{4a}[1+\frac{2i\hbar at}{m}] \;=\; -\frac{bk^2}{2}$$

در حالی که

$$b \;=\; \frac{1}{2a}\left(1+\frac{2i\hbar at}{m}\right)$$

تابع موج به صورت زیر نوشته می شود:

$$\begin{aligned}\Psi(x,t) \quad &= \quad \left(\frac{1}{2\pi a}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{1}{b}}\, e^{-\frac{x^2}{2b}} \\ &= \quad \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{1+\frac{2i\hbar at}{m}}}\; \exp[-\frac{ax^2}{(1+\frac{2i\hbar at}{m})}]\end{aligned}$$

. تابع احتمال به صورت:

$$|\Psi(x,t)|^2 \;=\; \sqrt{\frac{2a}{\pi}}\,\frac{1}{\sqrt{1+(\frac{2\hbar at}{m})^2}}\,e^{-\frac{2ax^2}{1+(\frac{2\hbar at}{m})^2}}$$

با محاسبه مقدار چشم داشتی برای $x^۲$ خواهیم داشت که:

$$\langle x^2\rangle \;=\; \frac{1}{4a}\left[1+\left(\frac{2\hbar at}{m}\right)^2\right]$$

از آنجایی که مقدار چشم داشتی مکان صفر است می توان گفت که مقدار اولیه پهن شدکی تابع موج برابر a ¼ می باشد.

با در نظر گرفتن:

$$\sigma_0^2 = 1/(4a)$$

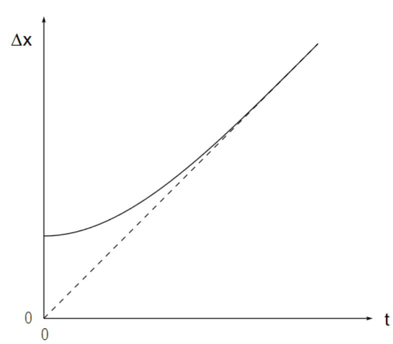
می توان تغییرات مقدار چشم داشتی برای $x^۲$ با زمان را به صورت زیر نوشت:

$$\langle x^2\rangle_t \;\equiv\; \sigma_x^2(t) \;=\; \sigma_0^2 \;+\; \frac{\hbar^2t^2}{4m^2\sigma_0^2}$$

که نشان می‌دهد با گذشت زمان پهن شدگی تابع موج افزایش پیدا می کند به علاوه هرچه سیگمای اولیه کمتر باشد این تغییرات شدید تر و سریع تر خواهند بود. می توان گفت بسته موج مانند ذرات کلاسیکی حرکت خواهد کرد اما عدم قطعیت آن افزایش پیدا می کند، با رادیکال گرفتن از رابطه تعریف شده در بالا می توان تغییرات عدم قطعیت با زمان را به دست آورد،

$$(\Delta x)_t = \frac{\sigma}{\sqrt{2}}\sqrt{1+\left(\frac{\hbar}{m\sigma^2}t\right)^2}.$$

که تابع آن به صورت شکل زیر خواهد بود:



۲.۴ سد پتانسیل

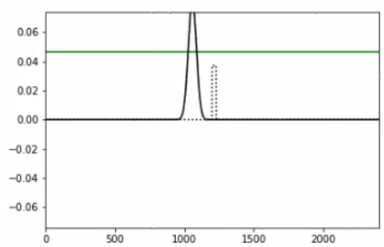
تابع سد به صورت زیر تعریف می شود:

$$V(x) = V_0 \ \text{for}\ 0 \le x \le L$$
$$V(x) = 0 \ \text{for}\ x < 0 \ and\ x > L.$$

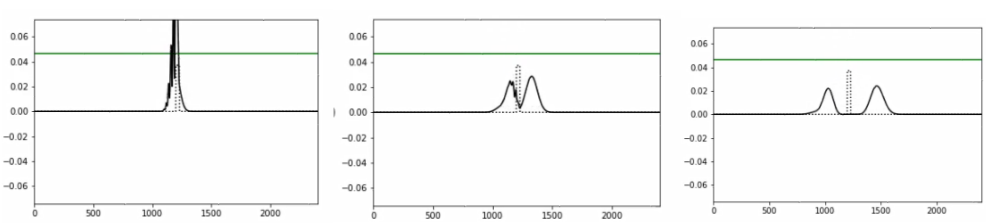
بسته موج از سمت چپ به سد نزدیک خواهد شد، پس از حل معادله شرودینگر سه پاسخ زیر را برای قبل از $x = 0$ بین x و l و برای $x>l$ خواهیم داشت:

$$\Psi_I = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$
$$\Psi_{II} = Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}$$
$$\Psi_{III} = Fe^{ik_1x}$$

این بدان معناست که ذره می‌تواند از سد عبور کند یا بازتابیده شود. در حقیقت احتمالی برای عبور از سد و احتمالی برای بازتاب ذره وجود خواهد داشت. حتی ذره پس از نفوذ در سد و در حین خروج می تواند بازتابیده شود یا عبور پیدا کند، در نهایت اگر ذره از سد عبور پیدا کند به حرکت خود به سمت راست ادامه خواهد داد. اگر انرژی ذره از پتانسیل پیش رو بیشتر باشد با دید کلاسیکی هم می توان درک کرد که ذره با احتمالی می توانسته از سد عبور کند. همانطور که شبیه سازی نیز این مشاهده را تایید می‌کند:



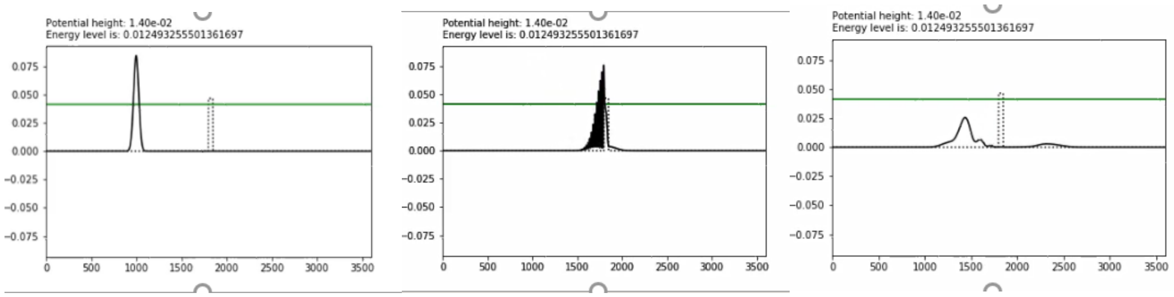
تابع موج را قبل از برخورد به سد نشان می دهد، انرژی تابع موج حدود دو برابر انرژی پتانسیل سد در نظر گرفته شده است. E با رنگ سبز نشان داده شده است که انرژی کل بسته موج است و تابع احتمال بسته موج با رنگ مشکی نشان داده شده است. در حقیقت نمودار مشکلی نمودار احتمال است.



از سمت چپ به راست به ترتیب لحظه برخورد تابع موج با سد، لحظه عبور از سد و در نهایت عبور کامل از سد را نشان می‌دهد.

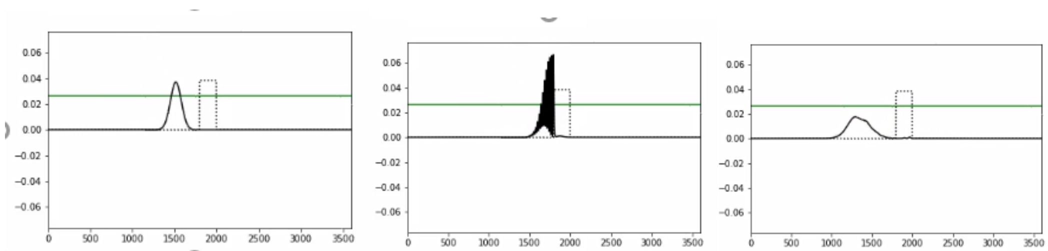
مشاهده می‌شود که در لحظه برخورد بسته موج به سد پیک‌هایی پشت سر هم ایجاد شده اند که علت آن ها این است که بسته موج هنگام برخورد با سد مقداری بازتاب میابد این در حالی است که بسته موج در حال حرکت به سمت راست است و این دو در لحظه برخورد با هم برهم نهی خواهند داشت.

قسمتی که مکانیک کوانتومی را از کلاسیک متمایز می کند این است که حتی اگر انرژی بسته موج کمتر از پتانسیل باشد، مکانیک کوانتومی باز هم مقداری احتمال عبور بسته موج از سد پتانسیل را نشان می‌دهد و بسته موج به طور کامل بازتاب نمیابد:

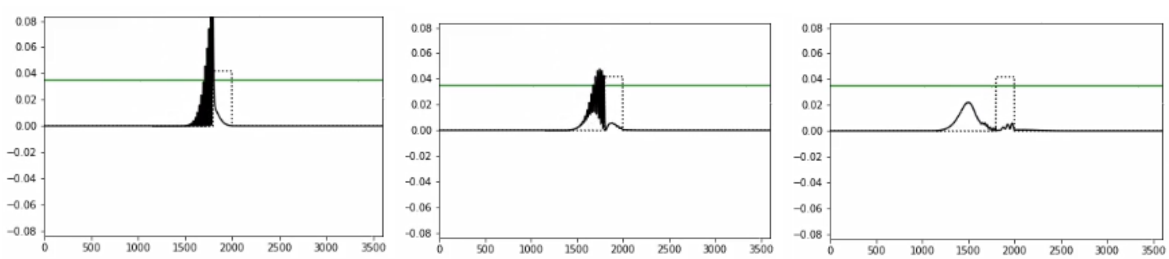


در شکل بالا انرژی بسته موج از سد پتانسیل برخوردی به آن کمتر است با این حال احتمال کمی برای حضور ذره در سمت دیگر سد وجود دارد. (راست ترین شکل)

برای مشاهده اینکه درون سد چه حالتی اتفاق می افتد قطر سد در شبیه سازی بعدی بیشتر شده است.



در این شکل مشاهده می‌شود ذره پس از نفوذ به سد انرژی کامل برای عبور کامل از سد را ندارد.



در شکل بالا در نهایت بخش بسیار کوچکی از بسته موج توانسته از سد عبور کند.

۴. ۳ پتانسیل پله

پتانسیل تابع پله به صورت زیر است:

$$V(x) = 0 \text{ for } x \leq 0,$$

$$V(x) = V_0 \text{ for } x > 0.$$

معادله شرودینگر برای پتانسیل پله به صورت زیر است:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -k^2 \psi(x)$$

$$U(x) = 0 \qquad x < 0 \qquad k^2 = k_1^{\,2} = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$U(x) = U_0 \qquad x > 0 \qquad k^2 = k_2^{\,2} = \frac{2m(E-U_0)}{\hbar^2}$$

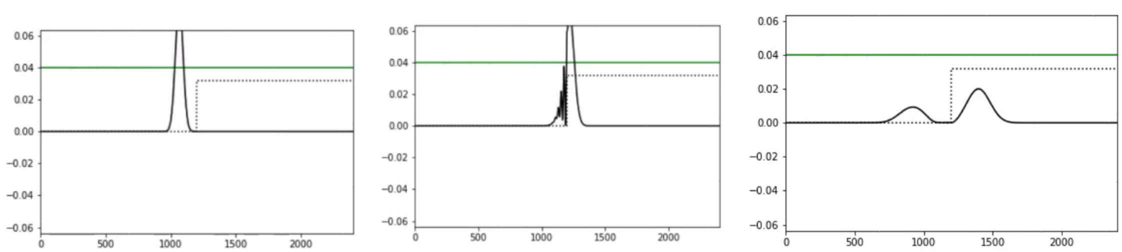
و پاسخ آن:

$$\Psi_1(x,t) = \left(A_I\, e^{i k_1 x} + A_R\, e^{-i k_1 x}\right) e^{-i\omega t}$$
$$\Psi_2(x,t) = \left(A_T\, e^{i k_2 x}\right) e^{-i\omega t}$$

در این حالت نیز اگر انرژی بسته موج از پله بیشتر باشد، احتمال حضور بسته موج در سمت پله و قبل آن وجود دارد (بخشی بازتاب و بخشی عبور میکند) که از دید کلاسیکی هم تایید میشود، نکته قابل توجه این است همانند حالت سد اگر انرژی از پتانسیل کمتر هم باشد احتمال نفوذ و عبور ذره و بسته موج باز هم وجود خواهد داشت. ممکن است اینگونه توجیه شود که چون بسته موج از موج هایی با تکانه های مختلف تشکیل شده است احتمال عبور آن موج ها وجود دارد اما لازم به ذکر است که حتی اگر تمام موج های تشکیل دهنده انرژی کمتری از پتانسیل داشته باشند هم احتمال نفوذ ذره وجود خواهد داشت. به این پدیده تونل زنی[1] گفته می شود.

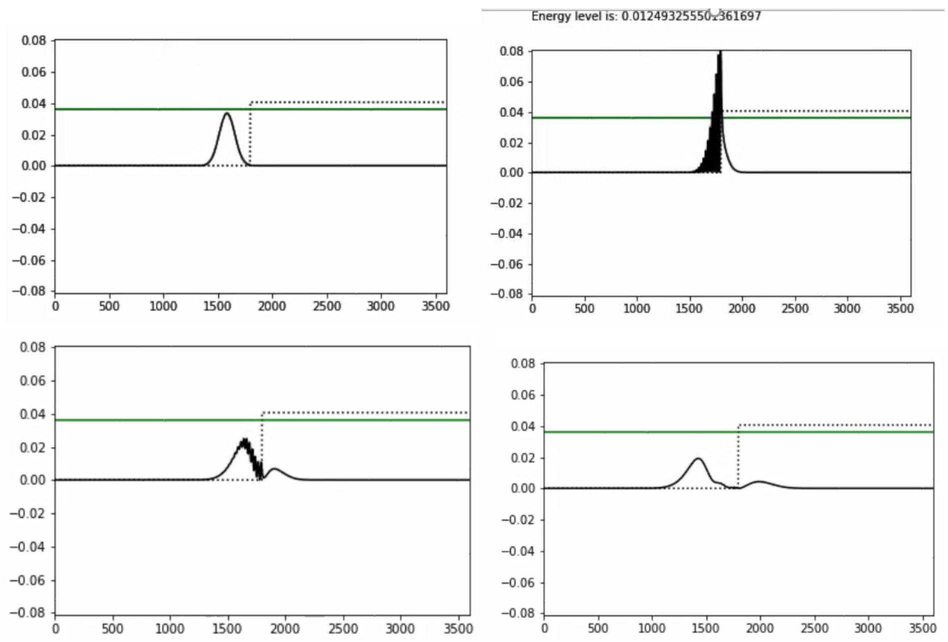
نتایج شبیه سازی:

برای حالتی که انرژی بسته موج از پتانسیل ذره بیشتر است:



[1] Tunneling

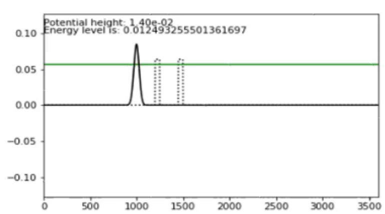
برای حالتی که انرژی بسته موج از پتانسیل کمتر است:



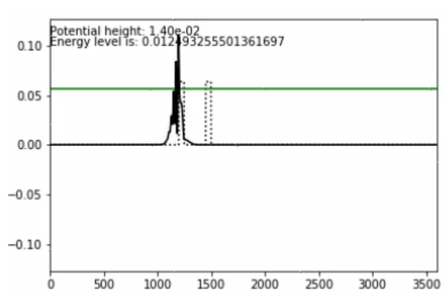
همانطور که مشاهده می شود، احتمال حضور ذره با وجود کمتر بودن انرژی آن در زیر پله وجود خواهد داشت. باید ذکر شود که به منظور مشاهده بهتر تصاویر $|\psi^{2}|$ و پتانسیل ها در ضریبی ضرب شده اند.

از موارد دیگری که بررسی شده اند می توان به موارد زیر اشاره کرد:

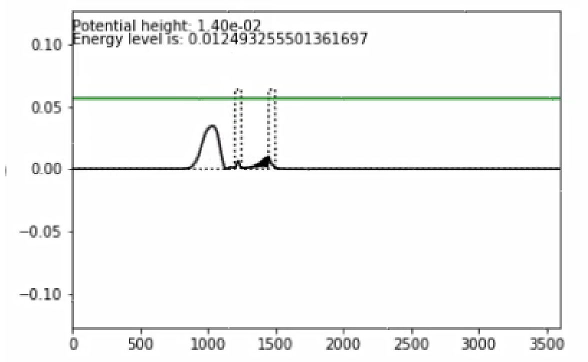
۱. وجود دو سد بر سر بسته موج



.a

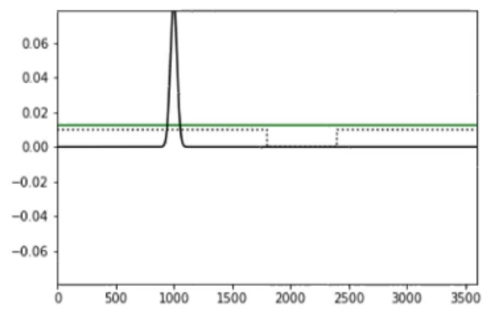


.b

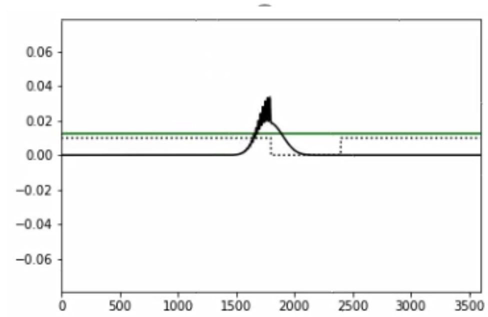


.c

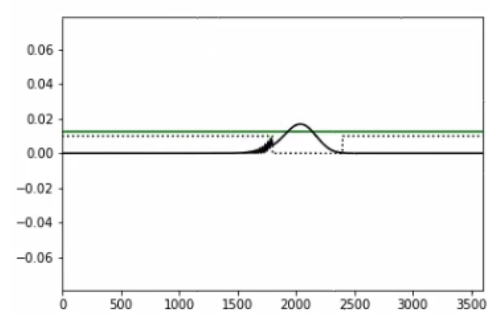
۲. چاه پتانسیل متناهی



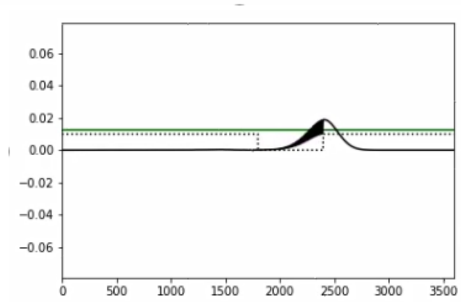
.a



.b



.c



.d

منابع:

/lectures/wave-packet/cohen-tanouji۰۸/fa۱۹۱http://www-inst.eecs.berkeley.edu/~cs

https://www.cond-mat.de/teaching/QM/JSim/wpack.html

.oberlin.edu/physics/dstyer/QM/Assignments/GaussianWavepacket.pdf۲http://www

/gwp/gwp.html۲۰۰http://musr.ca/~jess/p

http://www.phys.ubbcluj.ro/~emil.vinteler/nanofotonica/FDTD/FDTD_Nagel.pdf

.pdf۲۰۰۷http://www.astrosen.unam.mx/~aceves/Fisica_Computacional/ebooks/fdtd-QM-Sudiarta

FFDTD.pdf/.۵https://scipy-cookbook.readthedocs.io/_downloads/Schrodinger

http://www.physics.usyd.edu.au/teach_res/mp/doc/se_fdtd.pdf

https://web.phys.ksu.edu/vqm/vqmnextgen/qmbasics/wavepackets.pdf

۱&printable=۲۶۸۰https://www.open.edu/openlearn/ocw/mod/oucontent/view.php?id=

/freegauss.pdf۶۳۱/۱https://www.asc.ohio-state.edu/jayaprakash.

/lecture-۲۰۱۳-quantum-physics-ii-fall-۸-۰۵https://ocw.mit.edu/courses/physics/
.pdf۰۱_Chap_۱۳F۰۵_۸notes/MIT

.pdf۳_Phys_۲A/LAST/LEC/Lecture_۲۰۱۹A/۳https://physics.bgu.ac.il/COURSES/Physics

https://en.wikipedia.org/wiki/Wave_packet

http://abyss.uoregon.edu/~js/glossary/quantum_tunneling.html

/https://brilliant.org/wiki/quantum-tunneling

https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Suppleme
._Fundamental_Concepts_۰۲ntal_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Quantum_Mechanics/
of_Quantum_Mechanics/Tunneling

https://web.phys.ksu.edu/vqm/vqmnextgen/qmbasics/wavepackets.pdf

٪.۲۵۲Spreading٪.۲۵۲۰Packet٪.۲۵۲۰Wave٪.۲۵۲۰.۲۷۴/adkadkakdf/PDFfiles/۹http://www.phys.lsu.edu/~amarti
٪.۲Quantum٪.۲۵۲۰to٪.۲۵۲۰Applications٪.۲۵۲۰with٪.۲۵۲۰Effects٪.۲۵۲۰Squeezing٪.۲۵۲۰and٪.۲۵۲۰Temperature۰
Decoherence.pdf٪.۲۵۲۰and٪.۲۵۲۰Measurement۵۲۰

American journal of physics, vol35, no. 3, march 1967, computer generated motion pictures of one-dimensional Schrodinger's equation