

równanie Schroedingera zależne od czasu

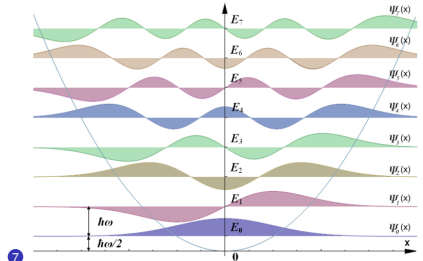
21 października 2021

Równanie Schroedingera zależne od czasu - przypadek zamkniętej przestrzeni

- równanie Schroedingera (zależne od czasu) $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$.
- Jeśli w warunku początkowym $\Psi(x, t = 0) = \Psi_n$ jest funkcja własną H (spełnia r.S. bez czasu, $H\Psi_n = E_n\Psi_n$).
- $\Psi(x, t) = \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar})\Psi_n(x)$ - forma separowalna, znana
- Dla ogólnych warunków początkowych, o ile H nie zależy od czasu:
$$\Psi(x, t) = \sum_n c_n \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar})\Psi_n(x)$$
- Funkcje własne operatora hermitowskiego odpowiadające różnym wartościom własnym są ortogonalne, dlatego:
- $c_m = \langle \Psi_m | \Psi(t = 0) \rangle$
- Będziemy mówili o metodach rozwiązywania numerycznego równania.
- Do rozwiązania potrzebne testy (1) zachowanie pakietu będącego superpozycją stanów (2) zachowanie wartości oczekiwanych (3) całki ruchu.

Oscylator harmoniczny

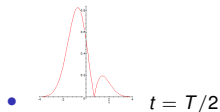
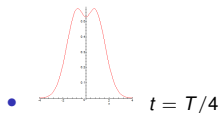
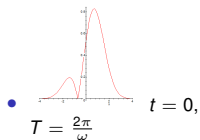
- 1 $V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2$
- 2 $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$
- 3 $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$
- 4 $\psi_n = C_n \exp(-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}) H_n(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x)$
- 5 H_n - wielomiany Hermita
- 6 $H_n(x) = A_n \exp(x^2) \frac{d^n}{dx^n} \exp(-x^2)$, $H_0 = 1$,
 $H_1 = x$, $H_2 = 2x^2 - 1$, $H_3 = 4x(x^2 - 3)$



- 7
- 8 rysunek z Wikipedii

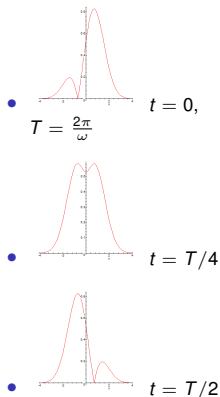
Oscylator harmoniczny - rozwiązania niestacjonarne

- $\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$, $E_0 = \hbar\omega/2$
- $\psi_1 = \left(\frac{4}{\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4} x \exp(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2)$, $E_1 = 3\hbar\omega/2$
- $\Psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_0 + \psi_1)$
- $\Psi(x, t) = \sum_n c_n \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \psi_n(x)$
- $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp(-i\frac{\omega}{2}t) (\psi_0 + \psi_1 \exp(-i\omega t))$
-
-
-



Oscylator harmoniczny - rozwiązania niestacjonarne

- $\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$, $E_0 = \hbar\omega/2$
- $\psi_1 = \left(\frac{4}{\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/4} x \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$, $E_1 = 3\hbar\omega/2$
- $\Psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0 + \psi_1)$
- $\Psi(x, t) = \sum_n c_n \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right)\psi_n(x)$
- $\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left(-i\frac{\omega}{2}t\right)(\psi_0 + \psi_1 \exp(-i\omega t))$
- $|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2}(\psi_0^2 + \psi_1^2 + 2\psi_0\psi_1 \cos(\omega t))$
- $\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos(\omega t)$
- $\langle p \rangle = -\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \sin(\omega t)$

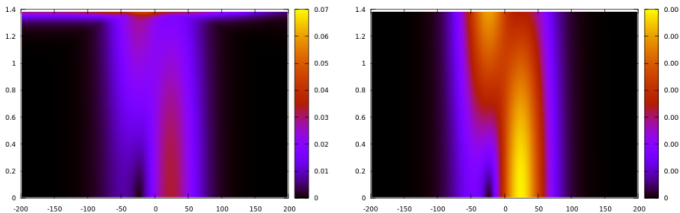


Równanie Schrödingera zależne od czasu: rozwiązanie numeryczne

- $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi.$
- $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$
- $i\hbar \frac{\Psi(x, t+dt) - \Psi(x, t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi(x+dx, t) + \Psi(x-dx, t) - 2\Psi(x, t)}{dx^2} + V(x)\Psi(x, t)$
- (podobną dyskretyzację stosowaliśmy dla metody czasu urojonego).
- $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t) - \frac{dt}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi(x+dx, t) + \Psi(x-dx, t) - 2\Psi(x, t)}{dx^2} + V(x)\Psi(x, t) \right)$
- **jawny schemat Eulera: dwupunktowy iloraz drugiej pochodnej i prawa strona liczona w chwili poprzedniej**
- ogólnie jawny schemat Eulera - równania cząstkowe z pierwszą pochodną czasową:
 $\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \hat{R}\{f(x, t)\} \rightarrow f(x, t + dt) = f(x, t) + dt\hat{R}\{f\}|_t$
- jawny (*explicit*) - krok czasowy funkcjonuje jak proste podstawienie

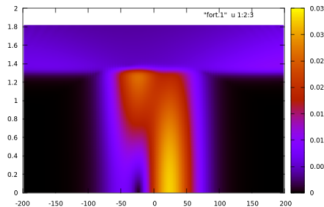
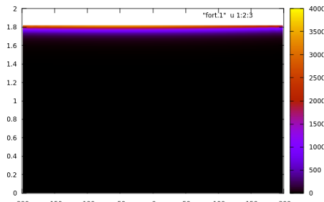
Równanie Schrödingera zależne od czasu: rozwiązanie numeryczne

- $dt = 3\text{jac}$, $\text{jac} = 2.42 \times 10^{-17}\text{s}$, $dx = 2\text{ nm}$



- na rysunkach - moduł z funkcji falowej, (jednostki, nm, ps)
- po lewej: rozwiązanie numeryczne, po prawej dokładne

Równanie Schrödingera zależne od czasu: rozwiązanie numeryczne



- nieco dłużej
- pakiet nie zachowuje normy (powinien, bo równanie zachowuje)

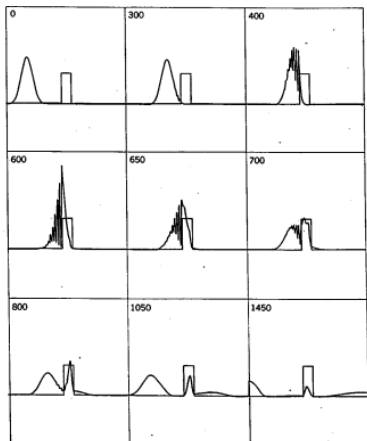
- po narzuceniu normalizacji (jednostki, nm, ps)
- takie nieszczęście - występuje niezależnie od dt , od dt zależy tylko moment w którym następuje destabilizacja pakietu, tutaj zresztą od początku jakościowo źle.
- dlaczego?

analiza von Neumanna

- $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t) + \frac{idt}{\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi(x+dx, t) + \Psi(x-dx, t) - 2\Psi(x, t)}{dx^2} + V(x)\Psi(x, t) \right)$
- $\Psi(x, t + dt) = \sum_k A_k^{t+dt} \exp(ikx)$
- $\Psi(x, t) = \sum_k A_k^t \exp(ikx), \beta = \frac{\hbar}{2mdx^2}$
- $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t) - i\beta dt (\Psi(x + dx, t) + \Psi(x - dx, t) - 2\Psi(x, t))$
- Ψ eksploduje wtedy i tylko wtedy gdy eksploduje A_k
- podstawiamy wyrażenia do schematu różnicowego, wykorzystujemy niezależność liniową fal płaskich $\exp(ikx)$ - opuszczając sumowanie po k
- $A_k^{t+dt} = A_k^t (1 - i\beta dt (\exp(ikdx) + \exp(-ikdx) - 2))$
- $A_k^{t+dt} = A_k^t (1 - 2i\beta dt (\cos(kdx) - 1))$
- $A_k^{t+dt} = M_k A_k^t$, gdzie $M_k = 1 - 2i\beta dt (\cos(kdx) - 1)$ - współczynnik wzmocnienia
- $|M_k|^2 = 1 + 4\beta^2 dt^2 (\cos(kdx) - 1)^2 \geq 1$ dla dowolnego k , prawie zawsze > 1

analiza von Neumanna

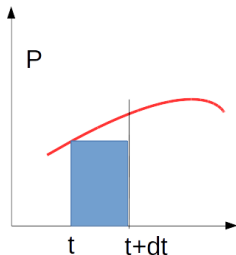
- $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t) - \frac{dt}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\Psi(x+dx, t) + \Psi(x-dx, t) - 2\Psi(x, t)}{dx^2} + V(x)\Psi(x, t) \right)$
- $|M_k|^2 = 1 + 4\beta^2 dt^2 (\cos(kdx) - 1)^2 \geq 1$ dla dowolnego k , prawie zawsze > 1
- nie ma tak krótkiego kroku czasowego aby ściśle ustabilizować schemat



- rysunek rozpraszania na barierze z podręcznika Schiffa

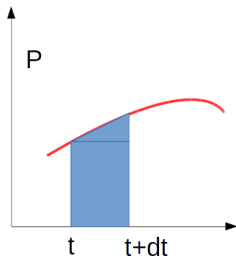
Schemat Eulera jako wzór prostokątów

- równanie cząstkowe 1 rzędu w t :
$$\frac{\partial f(x,t)}{\partial t} = \hat{R}\{f(x,t)\}$$
- $\frac{f(x,t+dt) - f(x,t)}{dt} = \hat{R}\{f(x,t)\}$ - jawny schemat Eulera
- przypadek trywialny
- $\frac{df(x,t)}{dt} = P(t)$
- $f(x,t+dt) = f(x,t) + \int_t^{t+dt} P(t')dt'$
- przepis jawnego Eulera
- $f(x,t+dt) \simeq f(x,t) + P(t)dt$
- wzór dokładnie całkuje funkcję stałą, w funkcji liniowej się myli (pomija ją), tak że
- $f(x,t+dt) = f(x,t) + P(t)dt + O(dt^2)$



Schemat Crank-Nicolson jako wzór trapezów

- dokładniejsza formuła: wzór trapezów
- $f(x, t + dt) = f(x, t) + \int_t^{t+dt} P(t') dt'$
- z jawnego Eulera
- $f(x, t + dt) \simeq f(x, t) + dt \frac{P(t) + P(t+dt)}{2}$
- wzór dokładnie całkuje funkcję liniową, w funkcji kwadratowej się myli
- $f(x, t + dt) = f(x, t) + \frac{P(t) + P(t+dt)}{2} dt + O(dt^3)$



- wersja dla równania $\frac{df(x,t)}{dt} = P(x, t)$
- $f(x, t + dt) = f(x, t) + \frac{P(x,t) + P(x,t+dt)}{2} dt$ - schemat Crank-Nicolson
- dokładniejszy w czasie o jeden rząd. Czy stabilny ?

CN: analiza von Neumanna

- $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t) - \frac{dt}{i\hbar} \left(-\frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{\Psi(x+dx, t) + \Psi(x-dx, t) - 2\Psi(x, t)}{dx^2} + \frac{\Psi(x+dx, t+dt) + \Psi(x-dx, t+dt) - 2\Psi(x, t+dt)}{dx^2} \right] \right)$
- $\Psi(x, t) = \sum_k A_k^t \exp(ikx), \beta = \frac{\hbar}{4mdx^2}$
- $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t) - i\beta dt (\Psi(x + dx, t) + \Psi(x - dx, t) - 2\Psi(x, t) + \Psi(x + dx, t + dt) + \Psi(x - dx, t + dt) - 2\Psi(x, t + dt))$
- podstawiamy wyrażenia do schematu różnicowego, wykorzystujemy niezależność liniową fal płaskich $\exp(ikdx)$ - opuszczając sumowanie po k
- $A_k^{t+dt} = A_k^t (1 - i\beta dt (\exp(ikdx) + \exp(-ikdx) - 2)) + A_k^{t+dt} (-i\beta dt (\exp(ikdx) + \exp(-ikdx) - 2))$
- $A_k^{t+dt} (1 + 2i\beta dt (\cos(kdx) - 1)) = A_k^t (1 - 2i\beta dt (\cos(kdx) - 1))$
- $A_k^{t+dt} = M_k A_k^t$, gdzie $M_k = \frac{1 - 2i\beta dt (\cos(kdx) - 1)}{1 + 2i\beta dt (\cos(kdx) - 1)}$ - współczynnik wzmocnienia
- $|M_k|^2 = 1$ dla każdego k , niezależnie od wielkości dt .
- Schemat może być niedokładny, gdy duże kroki dx, dt , ale ma niezależnie od dx, dt zachowywać normę
- Schemat CN jest *bezw warunkowo stabilny*.

Równanie Schrödingera zależne od czasu: rozwiązanie numeryczne

- $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$
- schemat Crank-Nicolson - odpowiednik kwadratury trapezów
- $i\hbar \frac{\Psi(x, t+dt) - \Psi(x, t)}{dt} = \frac{1}{2}(H\Psi(x, t+dt) + H\Psi(x, t))$

$$\Psi(x, t+dt) = \Psi(x, t) + \frac{dt}{2i\hbar}(H\Psi(x, t+dt) + H\Psi(x, t)) \quad (1)$$

- $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$
- rachunek na siatce różnicowej o skoku dx , $\nabla^2\Psi(x, t) \rightarrow \frac{\Psi(x+dx, t) + \Psi(x-dx, t) - 2\Psi(x, t)}{dx^2}$
- Funkcja falowa dla chwili $t + dt$ występuje po obydwu stronach równania (1). Przepis, nie funkcjonuje jako proste podstawienie. Schemat CN jest niejawnym (implicit).
- (1) po dyskretyzacji Hamiltonianu definiuje układ równań liniowych (H jest liniowy) do rozwiązania
- (1) można rozwiązywać przez prostą iterację (relaksacja) - co nie jest sposobem najszybszym, ale najłatwiejszym w implementacji

Równanie Schrödingera zależne od czasu: rozwiązanie numeryczne

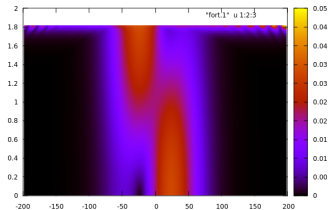
- $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t) + \frac{dt}{2i\hbar} (H\Psi(x, t + dt) + H\Psi(x, t))$
- po dyskretyzacji
-

$$\begin{aligned}\Psi^{\nu+1}(x, t + dt) = & \Psi(x, t) + \frac{i\hbar dt}{4mdx^2} [\Psi(x + dx, t) + \Psi(x - dx, t) - 2\Psi(x, t) \\ & + \Psi^{\nu}(x + dx, t + dt) + \Psi^{\nu}(x - dx, t + dt) - 2\Psi^{\nu}(x, t + dt)] \\ & + \frac{dt}{2i\hbar} [V(x, t)\Psi(x, t) + V(x, t + dt)\Psi^{\nu}(x, t + dt)]\end{aligned}$$

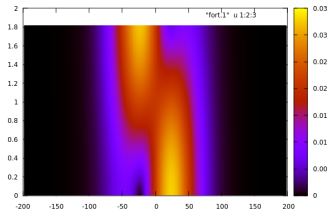
- iterować po ν aż do uzgodnienia, np. z $\Psi^0(x, t + dt) = \Psi(x, t)$

Równanie Schrödingera zależne od czasu: rozwiązanie numeryczne

- ν do 1



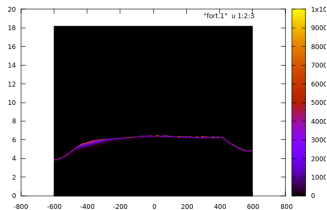
- ν do 3



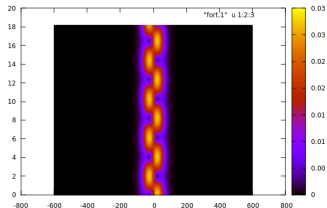
- $dt = 3jac$, $jac = 2.42 \times 10^{-17} \text{s}$, $dx = 2 \text{ nm}$

Równanie Schrödingera zależne od czasu: rozwiązanie numeryczne

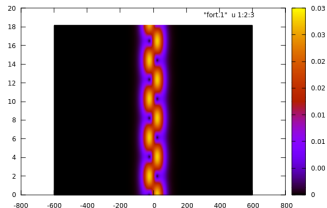
- ν do 1



- ν do 2



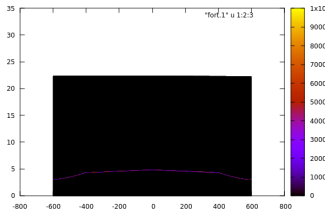
- ν do 3



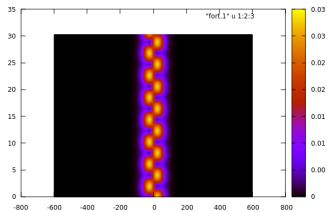
- $dt = 30\text{jac}$, $\text{jac} = 2.42 \times 10^{-17}\text{s}$, $dx = 2\text{ nm}$

Równanie Schrödingera zależne od czasu: rozwiązanie numeryczne

- ν do 5



- ν do 6



- $dt = 100j\text{ac}$, $j\text{ac} = 2.42 \times 10^{-17}\text{s}$, $dx = 2\text{ nm}$
- liczba iteracji - potrzebna do ustabilizowania rachunki silnie zależy od dt .

schemat CN jako URL

- $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t) + \frac{dt}{2i\hbar} (H\Psi(x, t + dt) + H\Psi(x, t))$

-

$$\begin{aligned} & \Psi(x, t + dt) + \frac{\hbar dt}{4m dx^2} [\Psi(x + dx, t + dt) + \Psi(x - dx, t + dt) - 2\Psi(x, t + dt)] \\ & - \frac{dt}{2i\hbar} V(x, t + dt) \Psi(x, t + dt) \\ = & \\ & \Psi(x, t) - \frac{\hbar dt}{4m dx^2} [\Psi(x + dx, t) + \Psi(x - dx, t) - 2\Psi(x, t)] \\ & + \frac{dt}{2i\hbar} V(x, t) \Psi(x, t) \end{aligned}$$

schemat CN jako URL

$$\bullet \begin{pmatrix} 1 - 2\beta - \alpha V_1 & \beta & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \beta & 1 - 2\beta - \alpha V_2 & +\beta & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 1 - 2\beta - \alpha V_3 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \beta & 1 - 2\beta - \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1(t+dt) \\ \Psi_2(t+dt) \\ \Psi_3(t+dt) \\ \dots \\ \Psi_N(t+dt) \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 + 2\beta + \alpha V_1 & -\beta & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -\beta & 1 + 2\beta + \alpha V_2 & -\beta & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -\beta & 1 + 2\beta + \alpha V_3 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\beta & 1 + 2\beta + \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_1(t) \\ \Psi_2(t) \\ \Psi_3(t) \\ \dots \\ \Psi_N(t) \end{pmatrix}$$

- $\alpha = \frac{dt}{2i\hbar}$, $\beta = \frac{\hbar dt}{4m dx^2}$
- macierz trójprzekątniowa - tridiag (numerical recipes)

tridag

dla $n=N-1$

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & c_1 & & & & \\ b_2 & a_2 & c_2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & b_n & a_n & c_n \end{pmatrix}$$

rozwiązać $Au=f$

dekompozycja

$$\begin{matrix} A=LU \\ LUu=f \end{matrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ \beta_2 & 1 & & & & \\ & \beta_3 & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \beta_n & 1 & \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \gamma_1 & & & & \\ & \alpha_2 & \gamma_2 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ & & & \alpha_{n-1} & \gamma_{n-1} & \\ & & & & \alpha_n & \end{bmatrix}$$

$$\gamma_i = c_i$$

$$\alpha_1 = a_1,$$

$$\beta_i = b_i/\alpha_{i-1}$$

$$\alpha_i = a_i - \beta_i\gamma_{i-1}$$

$$\begin{matrix} Uu=z \\ Lz=f \end{matrix}$$

$$z_1 = f_1$$

$$z_2 = f_2 - \beta_2 z_1$$

\vdots

$$z_i = f_i - \beta_i z_{i-1}$$

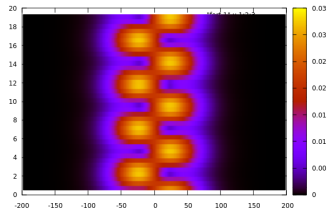
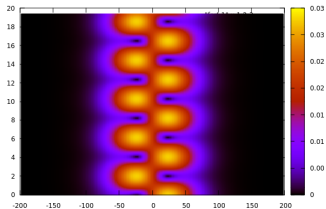
$$\begin{aligned} u_n &= z_n/\alpha_n \\ u_{n-1} &= \frac{z_{n-1} - \gamma_{n-1}u_n}{\alpha_{n-1}} \end{aligned}$$

itd..

5n mnożeń /dzielenń
3n dodawań / odejmowań

podczas gdy eliminacja Gaussa
 $n^3/3$ operacji

Równanie Schrödingera zależne od czasu: rozwiązanie numeryczne

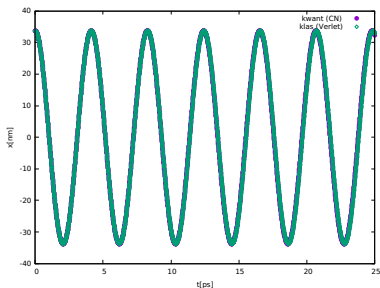


- porównanie: krok czasowy 10 j. atomowych (lewo) oraz 2048 j. atomowych (pravo)
- w tym drugim przypadku - iterowanie wzoru CN jak kilka slajdów wyżej, nie pozwala na osiągnięcie zbieżności
- widać - różnicę w okresie oscylacji, ale rachunek stabilny i jakościowo poprawny

Oscylator harmoniczny: rozwiązanie klasyczne a kwantowe

- $V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2$
- kwantowo : $\phi(x, t)$,
- $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$
- $i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = H\phi$
- klasycznie : $x(t), v(t)$
- $\frac{dx}{dt} = v$
- $m \frac{dv}{dt} = -\frac{d}{dx} V(x)$
- numeryczny rachunek klasyczny
 $a_n = -\frac{\nabla V|_{x_n}}{m}$
- schemat Verleta
- $x_{n+1} = x_n + \Delta t v_n + \frac{\Delta t^2}{2} a_n$
- $v_{n+1} = v_n + \frac{\Delta t}{2} (a_n + a_{n+1})$
- Verlet startowany od $v(t=0) = 0$, oraz $x(t=0) = \langle \Psi(x, t=0) | x | \Psi(x, t=0) \rangle$
- wynik: "odczas1.gif"

Oscylator harmoniczny: rozwiązanie klasyczne a kwantowe



- rachunek CN oraz rachunek Verleta
- Verlet startowany od $v(t = 0) = 0$, oraz $x(t = 0) = \langle \Psi(x, t = 0) | x | \Psi(x, t = 0) \rangle$
 $V(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2$

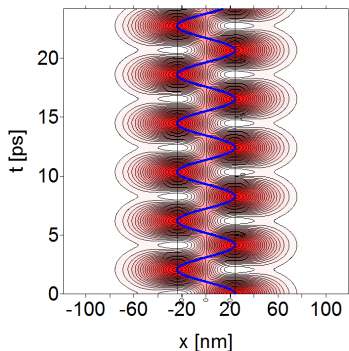
- numeryczny rachunek klasyczny
- schemat Verleta
- $x_{n+1} = x_n + \Delta t v_n + \frac{\Delta t^2}{2} a_n$
- $v_{n+1} = v_n + \frac{\Delta t}{2} (a_n + a_{n+1})$
- oraz $\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_0 + \Psi_1)$
- wynik: "odczas1.gif"

Oscylator harmoniczny: rozwiązanie klasyczne a kwantowe

- przypadek ?
- $|\Psi(x, t)|^2 = \frac{1}{2}(\Psi_0^2 + \Psi_1^2 + 2\Psi_0\Psi_1 \cos(\omega t))$
- $\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cos(\omega t)$
- $\langle p \rangle = -\sqrt{\frac{m\omega\hbar}{2}} \sin(\omega t)$
- $\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m}$ (jak w klasycznej definicji prędkości)
- $\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -m\omega^2 \langle x \rangle = \langle -\nabla V(x) \rangle$ (jak w II zasadzie dynamiki Newtona)
- inne rachunki numeryczne:
- (odczasu2.gif) w funkcji startowej zamiast ω , $\omega/2$
- (odczasu3.gif) Funkcja falowa stanu podstawowego przesunięta w prawo

Pakiet falowy

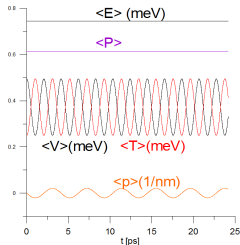
- $\hbar\omega = 1 \text{ meV}$, $m = 0.067m_0$ (GaAs)
- warunek początkowy jak w przykładzie wyżej
- $\Psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_0 + \Psi_1)$
- klasycznie: $\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}$, $\frac{dp}{dt} = -\nabla V(x)$
- Z Tw. Ehrenfesta - słuszne dla dowolnego potencjału
 - 1 $\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\langle \nabla V \rangle$
 - 2 $\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle$



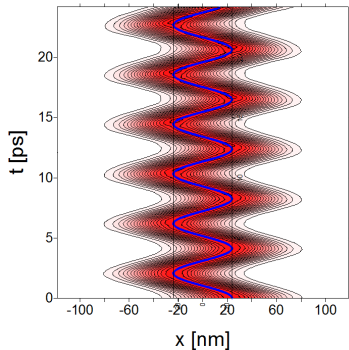
-
- gęstość prawdopodobieństwa,
- niebieska: ścieżka klasyczna

Pakiet falowy II

- $\hbar\omega = 1$ meV, $m = 0.067m_0$ (GaAs)
- warunek początkowy - fcja falowa stanu podstawowego, sztucznie przesunięta w prawo o $x_s = 23.6$ nm (wartość średnia z poprzedniego rachunki) $\Psi(x, t = 0) = \Psi_0(x - x_s)$.



- średnie: energii kinetycznej, potencjalnej, całkowitej, parzystości, pędu



- gęstość prawdopodobieństwa, oraz średnie położenie pakietu
- niebieska linia - wynik klasyczny bez zmian

Twierdzenie Ehrenfesta

- $\frac{d}{dt} \langle \Psi(x, t) | A \Psi(x, t) \rangle = \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle$
 - ① $[p, H] = -i\hbar \nabla V(x) \rightarrow \frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\langle \nabla V \rangle$
 - ② $[x, H] = i\hbar p_x / m \rightarrow \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p_x \rangle$
- twierdzenie: wskazywane jako II zasadę dynamiki Newtona jako graniczny wynik mechaniki kwantowej (albo r. Schrödingera)

Pakiet falowy

- do potencjału oscylatora harmonicznego dodajemy rdzeń odpychający
- $V = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + 5\hbar\omega \exp(-\frac{x^2}{l^2})$ z $l = 10$ nm
- start: $\Psi(x, t = 0) = \Psi_0(x - x_0)$ z $x_0 = 0.3$ pm.
- chwiejna.gif
- ewidentnie - rozbieżność klasycznego położenia oraz kwantowomechanicznej wartości oczekiwanej

Pakiet falowy

- do potencjału oscylatora harmonicznego dodajemy rdzeń odpychający
- $V = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + 5\hbar\omega \exp(-\frac{x^2}{l^2})$ z $l = 10$ nm
- start: $\Psi(x, t = 0) = \Psi_0(x - x_0)$ z $x_0 = 50$ nm.
- zredzenie.gif
- średnia kwantowa znajduje się tam, gdzie klasyczna nie potrafi
- $\frac{d}{dt} \langle \Psi(x, t) | A \Psi(x, t) \rangle = \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle$
 - 1 $[p, H] = -i\hbar \nabla V(x) \rightarrow \frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\langle \nabla V \rangle$
 - 2 $[r, H] = i\hbar p/m \rightarrow \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle$
- Wartości oczekiwane spełniają klasyczne równania ruchu
- pytanie: czy środek pakietu porusza się po klasycznej trajektorii ?
- nie całkiem, byłoby tak gdyby w równaniu (1): $\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\nabla V|_{\langle x \rangle}$
- równania klasyczne i kwantowe mają identyczny sens gdy pakiet silnie zlokalizowany w porównaniu z odległościami jakie pokonuje

Równanie Schroedingera zależne od czasu otwarta przestrzeń

- równanie Schroedingera (zależne od czasu)
- $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$.
- równanie niezależne od czasu $H\Psi_k = E_k \Psi_k$
- otwarta przestrzeń, znaczy próżnia, $V(x) = 0$
- $\Psi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx)$, $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

superpozycja stanów własnych pędu (fal płaskich)

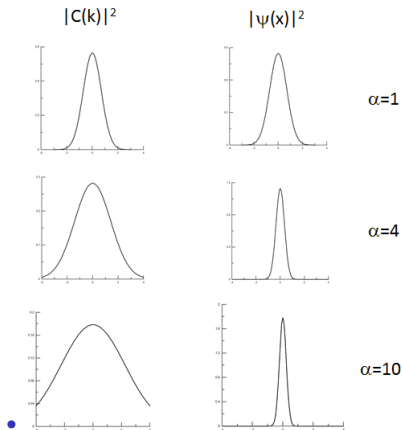
- $H\Psi_k = E_k\Psi_k$
- $V(x) = 0$
- $\Psi_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx)$, $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
- weźmy superpozycję fal płaskich dla różnych wartości k ,
$$\psi(x, t = 0) = \sum_k C(k) \exp(ikx) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx) dk$$
- niech $C(k, t = 0) = \left(\frac{1}{2\alpha\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{k^2}{4\alpha}\right)$
- wtedy $\int_{-\infty}^{+\infty} |C(k)|^2 dk = 1$
- bo $\int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-\beta y^2) dy = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{\beta}}$
- $\psi(x, t = 0) = \frac{2^{1/4} \alpha^{1/4}}{\pi^{1/4}} \exp(-\alpha x^2)$

superpozycja stanów własnych pędu (fal płaskich)

- związki między $C(k)$ a $\psi(x)$ dane przez transformatę Fouriera
- $C(k) = \left(\frac{1}{2\alpha\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{k^2}{4\alpha}\right)$
- $\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx) dk$
- $\psi(x) = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \exp(-\alpha x^2)$
- $C(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-ikx) dx$
- $|\psi(x)|^2$ - gęstość prawdopodobieństwa w przestrzeni położen
- $|C(k)|^2$ - gęstość prawdopodobieństwa w przestrzeni wektora falowego
- fala płaska z wektorem k opisuje funkcję własną pędu: $p = \hbar k$ (cząstka opisana tą funkcją falową niesie pęd $\hbar k$)

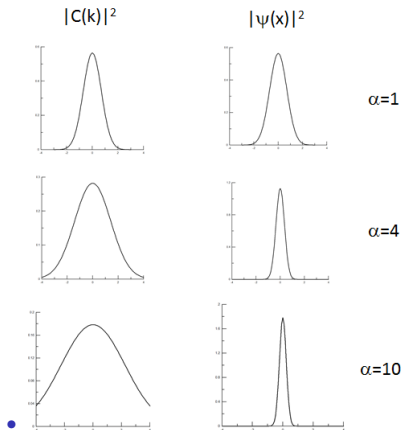
superpozycja fal płaskich

- $|\psi(x)|^2$ - gęstość prawdopodobieństwa w przestrzeni położenia
- $|C(k)|^2$ - gęstość prawdopodobieństwa w przestrzeni wektora falowego (pędu) $p = \hbar k$
- $|C(k)|^2 = \left(\frac{1}{2\alpha\pi}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{k^2}{2\alpha}\right)$
- $|\psi(x)|^2 = \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \exp(-2\alpha x^2)$
- dokładnie określony pęd: całkowicie zdelokalizowana cząstka i odwrotnie



odchylenie standardowe dla położenia i czasu

- wariancja położenia
 $(\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (x - \langle x \rangle)^2 |\psi(x)|^2 dx$
- wariancja wektora falowego
 $(\Delta k)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (k - \langle k \rangle)^2 |C(k)|^2 dk$
- $\psi(x) = \frac{2^{1/4} \alpha^{1/4}}{\pi^{1/4}} \exp(-\alpha x^2)$
- $\int_{-\infty}^{\infty} y^2 \exp(-\beta y^2) dy = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{\beta^{3/2}}$
- $(\Delta x)^2 = \frac{1}{4\alpha}$
- $(\Delta k)^2 = \alpha$
- $(\hbar \Delta k)^2 = (\Delta p)^2 = \hbar^2 \alpha$
- relacja nieoznaczoności dla pakietu gaussowskiego: $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$
- dla dowolnej funkcji falowej:
- $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ (relacja Heisenberga)



zasada nieoznaczoności Heisenberga

- pakiet gaussowski: $\psi(x) = \frac{2^{1/4} \alpha^{1/4}}{\pi^{1/4}} \exp(-\alpha x^2)$
- relacja nieoznaczoności dla pakietu gaussowskiego: $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$
- dla dowolnej funkcji falowej: $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ (relacja Heisenberga)
- im lepiej określone położenie - tym mniej wiemy o pędzie

superpozycja stanów własnych pędu (fal płaskich)

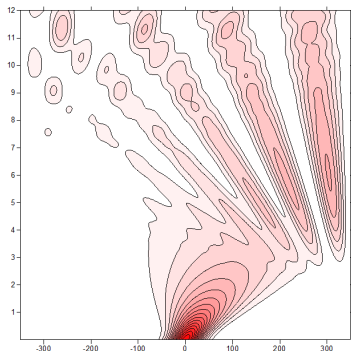
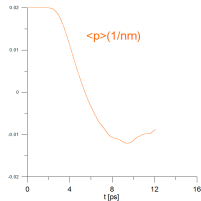
- $\psi(x, t = 0) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx) dk$
- $C(k, t = 0) = \left(\frac{1}{2\alpha\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{k^2}{4\alpha}\right)$
- $\psi(x, t = 0) = \frac{2^{1/4} \alpha^{1/4}}{\pi^{1/4}} \exp(-\alpha x^2)$
- $\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} C(k, t) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx) dk$
- $C(k, t) = C(k, 0) \exp\left(-i \frac{E_k t}{\hbar}\right)$
- $|C(k, t)|^2 = |C(k, t = 0)|^2$
- $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-av^2) dv = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$
- $\psi(x, t) = \frac{2^{1/4} \alpha^{1/4}}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{1+2i\alpha\hbar t/m}} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{1+2\alpha \frac{i\hbar t}{m}}\right)$
- $|\psi(x, t)|^2 = A \exp\left(\frac{-2\alpha x^2}{1+\frac{4\alpha^2 \hbar^2 t^2}{m^2}}\right)$
- - relacja nieoznaczoności minimalna dla $t = 0$, potem rośnie ze względu na Δx
- pusta.gif

- pakiet z zerowym średnim pędem:
- niech $C(k, t = 0) = \left(\frac{1}{2\alpha\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{k^2}{4\alpha}\right)$
- $\psi(x, t = 0) = \frac{2^{1/4}\alpha^{1/4}}{\pi^{1/4}} \exp(-\alpha x^2)$
- $\psi(x, t) = \frac{2^{1/4}\alpha^{1/4}}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{1+2i\alpha\hbar t/m}} \exp\left(-\frac{\alpha x^2}{1+2\alpha\frac{i\hbar t}{m}}\right)$
- niezerowy średni pęd $\hbar k_0$:
- $C(k, t = 0) = \left(\frac{1}{2\alpha\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{4\alpha}\right)$
- $\psi(x, t = 0) = B \exp(-\alpha x^2) \exp(ik_0 x)$
- ponieważ
- $\frac{d}{dt} \langle p \rangle = -\langle \nabla V \rangle = 0$ oraz
- $\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{1}{m} \langle p \rangle$
- $\psi(x, t) = \frac{B}{\sqrt{1+2i\alpha\hbar t/m}} \exp\left(-\frac{\alpha(x-\frac{\hbar k_0 t}{m})^2}{1+2\alpha\frac{i\hbar t}{m}}\right) \exp(ik_0 x)$

- $\psi(x, t) = \frac{B}{\sqrt{1+2i\alpha\hbar t/m}} \exp\left(-\frac{\alpha(x - \frac{\hbar k_0}{m}t)^2}{1+2\alpha\frac{\hbar t}{m}}\right) \exp(ik_0x)$
- $C(k, t=0) = \left(\frac{1}{2\alpha\pi}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{4\alpha}\right)$
- idziei.avi
- warunek brzegowy $\psi(x = \text{brzeg}, t) = 0$ równoważny z $V(x = \text{brzeg}) \rightarrow \infty$
- po odbiciu: $\exp(-ik_0x)$
- w trakcie odbicia - interferencja fali idącej i odbitej $\exp(ik_0x) + \exp(-ik_0x) \rightarrow 2 \cos(k_0x)$
- na filmie: zwrócić uwagę na transformatę przy odbiciu

bieżący pakiet falowy

- $\Psi(x, t = 0) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$
- pęd średni jest zerowy (pakiet się rozplywa),
- nadać mu pęd
 $\Psi'(x, t = 0) = \Psi(x, t = 0) \exp(ik_0x)$, wtedy
 $\langle p \rangle = \hbar k_0$
- wyrzucony potencjał oscylatora, nieskończona studnia potencjału na końcu



- odbicia i interferencja. zanim dojdzie do odbicia - pęd zachowany

bieżący pakiet falowy

- schodekdol.avi
- k_0 ustawione jest tak, że $\hbar^2 k_0^2 / 2m = 5 \text{ meV}$
- dla $x > 0$ potencjał spada w dół
- $$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{dla } x < 0 \\ -W & \text{dla } x \geq 0 \end{cases} .$$

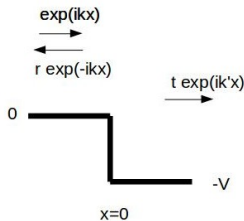
- odbicie od klifu
- interferencja tylko przed schodkiem
- za schodkiem większa prędkość pakietu
- $W = 50 \text{ meV}$: schodekdol50.avi
- $W = 250 \text{ meV}$ schodekdol250.avi

bieżący pakiet falowy

- k_0 ustawione jest tak, że $\hbar^2 k_0^2 / 2m = 5 \text{ meV}$
- dla $m = 0.067 m_0 \rightarrow k_0 = 0.0937/\text{nm}$.
- odbicie od klifu

problemy rozproszeniowe

- problemy rozpraszania: rozwiązujemy równanie Schrödingera $H\psi = E\psi$
 - jeśli cząstka z lewej to $E \geq 0$
 - ogólne rozwiązanie:
 - dla $x < 0$: $A \exp(-ikx) + B \exp(+ikx)$,
 - dla $x > 0$: $C \exp(-ik'x) + D \exp(+ik'x)$
 - $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - V$
-
- cząstka pada z lewej strony na skok potencjału
 - $\psi_{x < 0} = \exp(ikx) + r \exp(-ikx)$
 - zakładamy amplitudę 1 fali padającej (rozwiązujemy równanie własne, wektory własne określone z dokładnością do stałej multiplikatywnej)
 - r - amplituda fali odbitej, $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$
 - dla $x > 0$ fala która przeszła $\Psi_{x > 0} = t \exp(ik'x)$.



problemy rozproszeniowe

- problemy rozpraszania: rozwiązujemy równanie Schrödingera $H\psi = E\psi$ dla danej energii (ogólnie 2 rozwiązania $\hbar^2 k^2 / 2m$, $\pm k$, ruch w prawo i w lewo).

- cząstka pada z lewej strony na skok potencjału

- $\psi_{x < 0} = \exp(ikx) + r \exp(-ikx)$

- zakładamy amplitudę 1 fali padającej (rozwiązujemy równanie własne, wektory własne określone z dokładnością do stałej multiplikatywnej)

- r - amplituda fali odbitej, $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E$

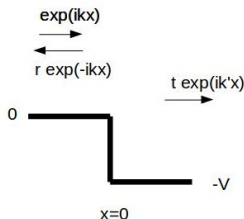
- dla $x > 0$ fala która przeszła

$$\Psi_{x > 0} = t \exp(ik'x), \quad \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - V = E$$

- ciągłość prądu prawdopodobieństwa

$$\psi_{x < 0}(x=0) = \psi_{x > 0}(x=0), \quad \text{oraz}$$

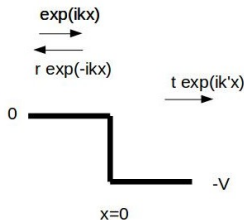
$$\psi'_{x < 0}(x=0) = \psi'_{x > 0}(x=0)$$



-
- $1 + r = t, k(1 - r) = tk'$
- $r = \frac{k-k'}{k'+k}, t = \frac{2k}{k'+k}$
- $V = 0, k' = k$, nie ma odbicia (nie ma się od czego odbić)

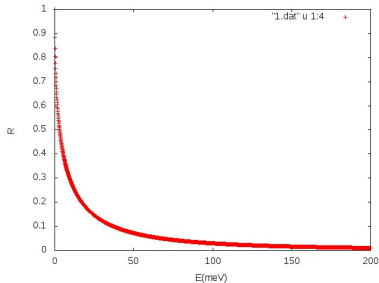
problemy rozproszeniowe

- $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E, \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - V = E$
- $\psi_{x < 0} = \exp(ikx) + r \exp(-ikx)$
- $\psi_{x > 0} = t \exp(ik'x)$
- $\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$
- prąd gęstości pstrwa fali padającej : $j_i = \frac{\hbar k}{2m}$,
odbitej $j_r = |r|^2 \frac{\hbar k}{2m}$, $j_t = |t|^2 \frac{\hbar k'}{2m}$
- BTW: wiemy że $j_i - j_r = j_t = j \neq f(x)$
- prawdopodobieństwo odbicia $R = \frac{j_r}{j_i}$,
transmisji $T = \frac{j_t}{j_i}$ i $T + R = 1$
- ponieważ $r = \frac{k - k'}{k' + k}$, $t = \frac{2k}{k' + k}$
- mamy $R = \frac{|k - k'|^2}{|k' + k|^2}$

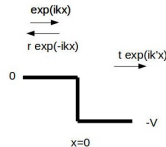


problemy rozproszeniowe

- $R = \frac{|k' - k|^2}{|k' + k|^2}$
- $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E, \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} - V = E$



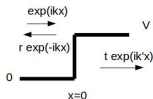
- odbicie - bardzo prawdopodobne, szczególnie dla niskich energii
- zjawisko bez odpowiednika w mechanice klasycznej



-
- skok potencjału: w (nano)technologii półprzewodnikowej kontakt dwóch półprzewodników o inaczej położonych pasmach przewodnictwa
- zamiast masy elektronu w próżni tzw. masa efektywna $m = 0.067 m_0$, skok potencjału 100 meV

problemy rozproszeniowe

- weźmy przeciwny schodek potencjału



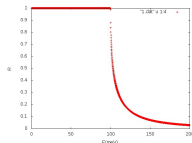
- $\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = E, \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + V = E$, więc 2 przypadki:

- (1) $E > V$: poprzednie wzory z k oraz k' obowiązują

- $R = \frac{|k' - k|^2}{|k' + k|^2}$

- (2) $E < V$: $\Psi_{x>0} = t \exp(-\kappa x)$,
 $-\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = E - V$; $\kappa = \pm \sqrt{2m(V - E)/\hbar^2}$

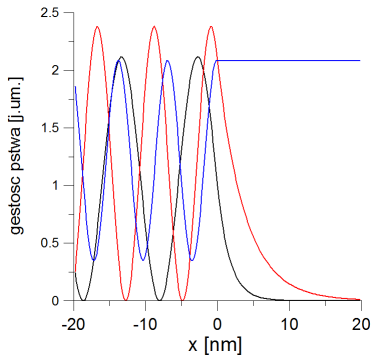
- odrzucamy rozwiązanie z minusem, bo eksplozja
- $\Psi_{x>0} = t \exp(-\kappa x) \rightarrow j_t = 0 \rightarrow R = 1$



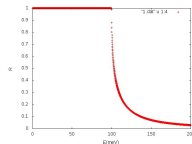
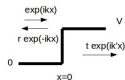
- głębokość wnikania $x_w = \frac{1}{\kappa}$, dla danych jak wyżej $V_e = 100$ meV, $E = 75$ meV, $x_w = 4.35$ nm.
- cząstkę można znaleźć w obszarze, w którym potencjał przekracza jej energię
- – widzieliśmy to już dla oscylatora harmonicznego w punkcie zmiany znaku drugiej pochodnej funkcji falowej

problemy rozproszeniowe

- weźmy schodek o wysokości 100 meV



-
- $E = 50$ meV, $E = 90$ meV, $E = 120$ meV



-
- głębokość wnikania $x_W = \frac{1}{\kappa_C}$, dla danych jak wyżej $V_e = 100$ meV, $E = 75$ meV, $x_W = 4.35$ nm.

- T5meVV5meV.gif
- pakiet o średnim k odpowiadającym wysokości progu potencjału
- $\hbar^2 k_0^2 / 2m = 5\text{meV} = V$
- dla $m = 0.067m_0 \rightarrow k_0 = 0.0937/\text{nm}$.
- odbite mniejsze k_0 , do obszaru bariery tuneluje część pakietu o wyższej energii.
- obydwie części pakietu poruszają się wolniej.

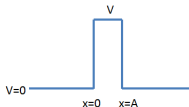
bariera potencjału

- szerokość bariery : 10nm, wysokość 10 meV, energia kinetyczna pakietu średnia: 5 meV, $m = 0.067m_0$, rozmiar pakietu - jak dla oscylatora harmonicznego z $\hbar\omega = 5$ meV.
- barier10.gif
- $\Psi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \Psi(k, t) \exp(ikx)$
- $\Psi(k, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi(x, t) \exp(-ikx)$
- za barierą:
- $\Psi_{x>za}(k, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{za}^{\infty} dx \Psi(x, t) \exp(ikx)$
- $P(k) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{|\Psi_{x>za}(k, t)|^2}{|\Psi(k, t=0)|^2}$
- trafu.gif
- k dla którego energia kinetyczna 10 meV = 0.1326 /nm.
- efekt tunelowy
- uwaga: do ∞ czasu potrzebne nieskończenie długie pudło
- uwaga 2: oscylacja na wysokim k - powód: 0/0
- uwaga: widzmy $P > 0$ dla $k < k_V$

bariera potencjału

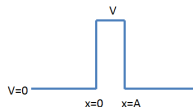
- do wyższej energii: parametry jak poprzednio, w tym k_0 bez zmiany, ale start z lokalizacją jak dla oscylatora z $\hbar\omega = 25$ meV
- fajnew25.gif
- latfw25.gif
- niemonotoniczna zależność od energii dla $E > V_0$

problem rozpraszania 1D: bariera

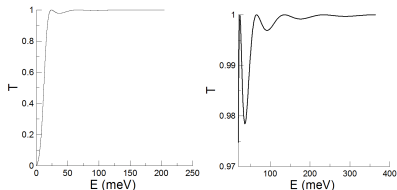


- regiony I, II, III : przed, w i za barierą; cząstka pada z lewej
- $E > V$, $k_I = k_{III} = k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $k_{II} = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$.
- $\Psi_{III} = t \exp(ikx)$ (odrzucaamy fale w lewo)
- $\Psi_{II} = c \exp(ik_{II}x) + d \exp(-ik_{II}x)$
- $\Psi_I = \exp(ikx) + r \exp(-ikx)$ (normalizacja amplitudy fali padającej do 1)
- $R = |r|^2$, $T = |t|^2$. $T = \left(1 + \frac{V^2 \sin^2(k_{II}A)}{4E(E-V)}\right)^{-1}$.
- cząstka nie zawsze przejdzie nawet jeśli $E > V$, $T = 1$ jeśli $k_{II}A = n\pi$
- $k_{II} = \frac{2\pi}{\lambda}$ warunek odpowiada $A = \frac{n\lambda}{2}$ czyli całkowitej liczba połówek długości fali w barierze: rezonanse, interferencja fal w przeciwnych kierunkach poruszających się w ramach bariery

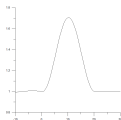
problem rozpraszania 1D: bariera



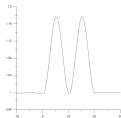
- wyniki dla $T(E)$, szerokość bariery $A = 20$ nm, wysokość 10 meV, $m = 0.067m_0$



- pierwszy rezonans $T(E) = 1$

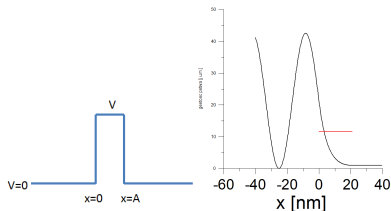


- drugi rezonans $T(E) = 1$



- rezonans: $k_{II}A = n\pi \rightarrow A = \frac{n}{2}\lambda'$
- interferencja w obszarze II pozwala na przezroczystość bariery przy skończonej energii

bariera $E < V$ efekt tunelowy



wynik: $E = 5 \text{ meV}$, $V = 10 \text{ meV}$, $A = 20 \text{ nm}$

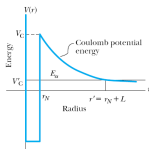
- regiony I, II, III : brzed, w i za bariera; czastka pada z lewej
- $E < V$, $k_I = k_{III} = k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, $\kappa = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$.
- $\Psi_{III} = t \exp(ikx)$ (odrzucamy fale w lewo)
- $\Psi_{II} = c \exp(\kappa x) + d \exp(-\kappa x)$
- $\Psi_I = \exp(ikx) + r \exp(-ikx)$ (normalizacja amplitudy fali padajacej do 1)
- $R = |r|^2$, $T = |t|^2$. $T = \left(1 + \frac{V^2 \sinh^2(\kappa A)}{4E(V-E)}\right)^{-1}$ gdy
 $\kappa A \gg 1 \rightarrow T = 16 \frac{E}{V} \left(1 - \frac{E}{V}\right) \exp(-2\kappa A)$

podwójna bariera

- 2 bariery, każda wysoka na 10 meV, szeroka na 20 nm
- szerokość centralnej studni $L = 100$ nm.
- 2bariery.gif
- pstwoztrafuzbest
- $\frac{n}{2} \lambda_F = L, k_n = n \frac{\pi}{L}, \Delta k = \frac{\pi}{L}$

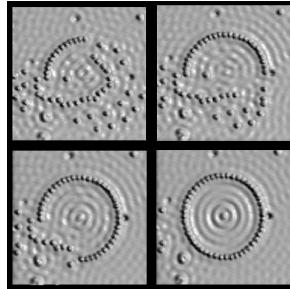
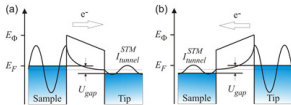
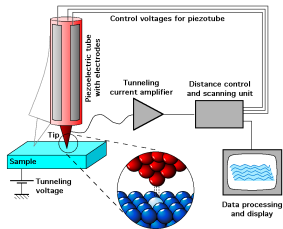
efekt tunelowy

- cząstka kwantowa potrafi uciec z uwięzienia mimo że jej energia niższa niż bariera potencjału



- rozpad α - jądro opuszcza cząstka o ładunku $+2e$ i energii rzędu 4-8 MeV
- podczas gdy $V_C \gg$ większe od tej energii tam gdzie zanikają siły jądrowe (dla $r = 1$ fm $Ze^2 / (4\pi\epsilon_0 r) = Z \times 1.44$ MeV)
- $kT = 1.44$ MeV dla $T = 16.87$ GK – nie ma takich temperatur , w środku Słońca 15 milionów K - fuzja na drodze tunelowania również
- czas życia izotopu α promieniotwórczego - różni się o 20 rzędów wielkości
- ... gdy $\kappa A \gg 1 \rightarrow T = 16 \frac{E}{V} (1 - \frac{E}{V}) \exp(-2\kappa A)$

skaningowy mikroskop tunelowy

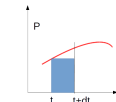
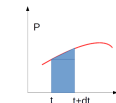
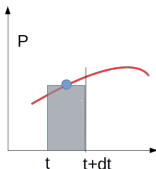


-
- żelazo na miedzi, IBM

- Schemat Cranka-Nicolson:
- $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t) + \frac{dt}{2i\hbar} (H\Psi(x, t + dt) + H\Psi(x, t))$
- zapewnia stabilność dla dowolnego kroku czasowego i dlatego – kontrolowaną dokładność
- wadą schematu jest konieczność rozwiązania układu równań liniowych - schemat nie działa jak proste podstawienie
- powyższe - staje się poważne, gdy w Hamiltonianie pojawiają się efektywne wyrażenia nieliniowe, zależne od funkcji falowej lub gęstości prawdopodobieństwa
- przydałby się stabilny schemat jawny – A. Askar, A.Cakmak, Journal of Chemical Physics, 68, 2794-2798 (1978)

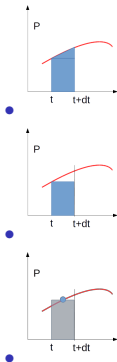
schematy

- $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$.
- $i\hbar \frac{\Psi(t+dt, x) - \Psi(t, x)}{dt} = H\Psi(t, x)$, jawny schemat Eulera, niestabilny niezależnie od dt
- $i\hbar \frac{\Psi(t+dt, x) - \Psi(t, x)}{dt} = \frac{1}{2} (H\Psi(t, x) + H\Psi(t + dt, x))$ - schemat CN, niejawny, stabilny niezależnie od dt
- schemat do całkowania – krok na podstawie wartości funkcji ze środka przedziału, znoszenie błędów i w konsekwencji dokładność jak dla trapezów



schematy

- $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$.
- $i\hbar \frac{\Psi(t+dt, x) - \Psi(t, x)}{dt} = H\Psi(t, x)$, jawny schemat Eulera, niestabilny niezależnie od dt , rząd dokładności pierwszy
- $i\hbar \frac{\Psi(t+dt, x) - \Psi(t, x)}{dt} = \frac{1}{2} (H\Psi(t, x) + H\Psi(t + dt, x))$ - schemat CN, niejawny, stabilny niezależnie od dt , rząd dokładności drugi
-
- $i\hbar \frac{\Psi(t+dt, x) - \Psi(t-dt, x)}{2dt} = H\Psi(t, x)$ - schemat Askara, jawny, rząd dokładności drugi
- wszystkie trzy *schematy spójne* z równaniem Schroedingera (spójny, znaczy w granicy zerowych kroków odnajdujemy właściwe równanie różniczkowe)
- pierwsze dwa: jednokrokowe, ostatni: dwukrokowy



schemat AK

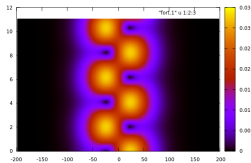
- $i\hbar \frac{\Psi(t+dt, x) - \Psi(t-dt, x)}{2dt} = H\Psi(t, x)$
- $\Psi(t + dt, x) = \Psi(t - dt, x) + \frac{2dt}{i\hbar} H\Psi(t, x)$ - schemat nazywany dla ogólnego równania różniczkowego zwyczajnego (zależność od czasu) schematem leapfrog
- schemat jest dwukrokowy - wymaga znajomości dwóch chwil czasowych aby policzyć trzecią
- analiza stabilności von Neumanna ($V = 0$)
- $\Psi(x, t) = \sum_k A_k^t \exp(ikdx)$
- $A_k^{t+dt} = A_k^{t-dt} - \frac{2dt}{i\hbar} A_k^t \left(\frac{\hbar^2}{2mdx^2} [2 \cos(kdx) - 2] \right)$
- postulat: $A_k^{t+dt} = M_k A_k^t$, $\alpha = \frac{dt\hbar}{mdx^2}$
- $M_k^2 - 2i\alpha M_k [\cos(kdx) - 1] - 1 = 0$

schemat AK

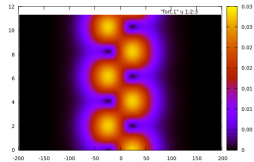
- postulat: $A_k^{t+dt} = M_k A_k^t$, $\alpha = \frac{dt\hbar}{mdx^2}$
- $M_k^2 - 2i\alpha M_k [\cos(kdx) - 1] - 1 = 0$, $\cos \equiv \cos(kdx)$
- $\Delta = 4(1 - \alpha^2(\cos - 1)^2)$
- $M_k = i\alpha(\cos - 1) \pm \sqrt{1 - \alpha^2(\cos - 1)^2}$
- o ile pod pierwiastkiem > 0 , to $\forall k |M_k|^2 = 1$
- $1 \geq \alpha^2(\cos - 1)^2$, $1 \geq \alpha^2 \times 2^2$, $\alpha \leq \frac{1}{2}$
- $dt \leq \frac{mdx^2}{2\hbar}$
- co jeśli liczba pod pierwiastkiem jest ujemna? $\alpha^2(\cos - 1)^2 > 1$
- jeśli $\exists k |M_k| > 1$ - niestabilność
- $|M_k|^2 = \left(\alpha(\cos - 1) \pm \sqrt{\alpha^2(\cos - 1)^2 - 1} \right)^2$
- moduł dla '+' - większy od 1 na pewno - niestabilność

schemat AK

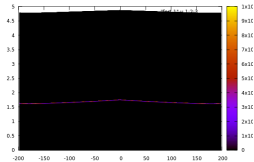
- przy $\hbar\omega = 0$ schemat stabilny dla $dt \leq \frac{mdx^2}{2\hbar}$, wyniki dla $\hbar\omega = 1 \text{ meV}$



- $dt = \frac{mdx^2}{2.1\hbar}$



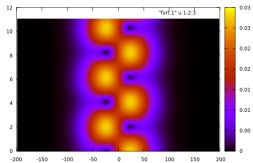
- $dt = \frac{mdx^2}{2.05\hbar}$



- $dt = \frac{mdx^2}{2.01\hbar}$

schemat AK

- $dt \leq \frac{m dx^2}{2\hbar}$



- dla $dx = 2$ nm (j.at. 2/.05292), $m = 0.067m_0$ (j.at. .067)
- $\frac{m dx^2}{2\hbar} = 47.58$ j.at.czasu (dla CN liczyliśmy i 2048 j.at. czasu)
- typowe dla schematów jawnych:
- uwaga 1: o krytycznym dla stabilności kroku czasowym decyduje krok przestrzenny
- uwaga 2: im gęstsza siatka w przestrzeni tym drobniejszy krok potrzebny dla czasu (typowe dla schematów jawnych)
- uwaga 3: jeśli potrzebna gęsta siatka nie mamy pełnej kontroli nad dokładnością w funkcji dt - nie możemy z niej zrezygnować, bo tracimy stabilność
- uwaga 4: jeśli gęsta siatka - lepiej rachunek ze schematem niejawnym - cena związana z URL do zapłacen

schematy różnicowe dla R.Schroedingera

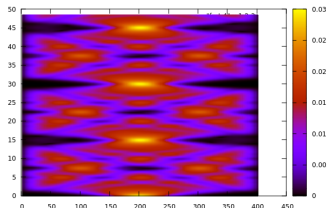
- $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$.
- CN:
- $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t) + \frac{dt}{2i\hbar} (H\Psi(x, t + dt) + H\Psi(x, t))$
- : niejawny, wymaga rozwiązania układu równań w każdym kroku, jednokrokowy, bezwarunkowo stabilny
- AK: $\Psi(x, t + dt) = \Psi(x, t - dt) + \frac{2dt}{i\hbar} H\Psi(x, t)$
- jawny, działa jak podstawienie, dwukrokowy, stabilny gdy $dt \leq \frac{m dx^2}{2\hbar}$ (dla cząstki w próżni)
- im drobniejsze dx tym mniejszy krok dt wymagany, zmniejszenie dx przy stałym dt może spowodować niestabilność, często brak możliwości kompromisu: dokładność / szybkość rachunku

schemat AK

- odpowiedź na pytanie z końca wykładu: uwzględnić potencjał oscylatora harmonicznego $\frac{m\omega^2 x^2}{2}$ w analizie von Neumanna - redukcja kroku krytycznego dla stabilności
- $\Psi(t + dt, x) = \Psi(t - dt, x) + \frac{2dt}{i\hbar} H\Psi(t, x)$
- $\Psi(x, t) = \sum_k A_k^t \exp(ikdx)$
- $f(x) = \sum_k a_k \exp(ikx) = \sum_{k_n} a_{k_n} \exp(ik_n x)$, przy czym $k = n\frac{\pi x}{L}$, $f(x + 2L) = f(x)$, pakiet falowy ma się mieścić od $-L$ do L
- parabola od $-L$ do L : $x^2 = \sum_{k_n} a_{k_n} \exp(ik_n x)$, z $a_0 = \frac{L^2}{3}$, $a_{k_n} = \frac{2(-1)^{|n|} L^2}{n^2 \pi^2}$
- $A_k^{t+dt} = A_k^{t-dt} - \frac{2dt}{i\hbar} A_k^t \left(\frac{\hbar^2}{2mdx^2} [2 \cos(kdx) - 2] + \frac{m\omega^2}{2} a_k \right)$
- $M_k^2 - \frac{2dt}{i\hbar} M_k \left(\frac{\hbar^2}{mdx^2} [1 - \cos(kdx)] + \frac{m\omega^2}{2} a_k \right)_* - 1 = 0$
- $\Delta = -\frac{4dt^2}{\hbar^2} (*)_* + 4$; $M_k = \frac{dt}{i\hbar} (*)_* \pm \sqrt{1 - \frac{dt^2}{\hbar^2} (*)_*^2}$
- jak w próżni: $|M_k| \leq 1$ wtedy i tylko wtedy gdy pod pierwiastkiem liczba dodatnia
- ograniczenie : $\forall k : dt^2 \leq \frac{\hbar^2}{(*)_*^2}$ czyli $dt \leq \frac{\hbar}{\frac{\hbar^2}{mdx^2} [1 - \cos(kdx)] + \frac{m\omega^2 a_k}{2}}$.
- najsilniejsze ograniczenie na krok czasowy ma a_0 zero składowa potencjału parabolicznego: zmienia się jak L^2 . dla stanu podstawowego oscylatora $\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{m\omega}$. Ogólnie: im wyższe ω tym silniejsza poprawka na krok czasowy.

układ zamknięty: powrót do warunku początkowego

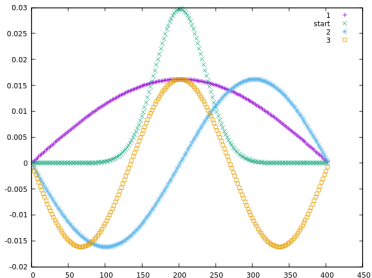
- warunek początkowy: gaussian w nieskończonej studni potencjału



- ewolucja (poziomo - położenie w nm, pionowo - czas w ps), okazuje się periodyczna

- w mechanice klasycznej: tw. o powrocie Poincaré - układ zachowawczy, ograniczony w przestrzeni fazowej, po pewnym czasie zbliża się dowolnie blisko warunku początkowego
- w mechanice kwantowej: układ ograniczony, dyskretne widmo energii - tutaj studni nieskończonej, skończona liczba stanów własnych w danym zakresie energii.
- $\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^k c_n \exp(-iE_n t / \hbar) \psi_n(x)$
- $c_n = \int_a^b \psi_n^*(x) \Psi(x, t = 0) dx$
- w naszym przypadku $\psi_n = A_n \sin(n\pi x / L)$ to funkcje studni nieskończonej, $E_n = \frac{n^2 \pi^2}{2mL^2}$

Powrót Poincaré

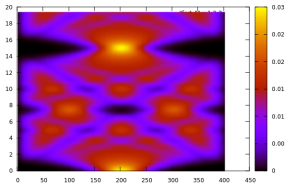


n	$ c_n $	$E(\text{meV})$
1	0.120911119468709	3.438881134222107E-002
2	1.283991472474891E-013	0.137546927627644
3	9.183006059675980E-002	0.309449397643555
5	5.296904332006864E-002	0.859304466893515
7	2.320480987763714E-002	1.68342206982430
9	7.720626353576380E-003	2.78100492588015
11	1.950947841633239E-003	4.15099119453381
13	3.744187117074755E-004	5.79205550254967
15	5.457417313918639E-005	7.70261022619612
17	6.041478145494365E-006	9.88080702716933

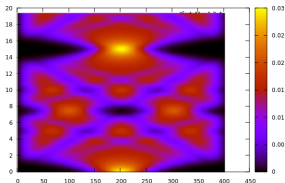
- $c_n = \int_a^b \psi_n^*(x) \Psi(x, t = 0) dx$
- w naszym przypadku $\psi_n = A_n \sin(n\pi x/L)$ to funkcje studni nieskończonej, $E_n = \frac{n^2 \pi^2}{2mL^2}$

Powrót Poincaré

- dokładny



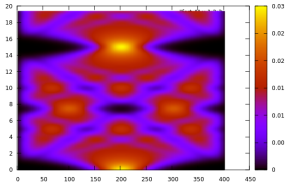
- do $n = 17$



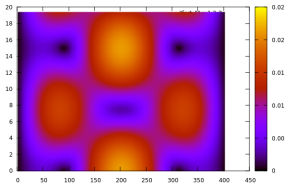
n	$ c_n $	$E(\text{meV})$
1	0.120911119468709	3.438881134222107E-002
2	1.283991472474891E-013	0.137546927627644
3	9.183006059675980E-002	0.309449397643555
5	5.296904332006864E-002	0.859304466893515
7	2.320480987763714E-002	1.68342206982430
9	7.720626353576380E-003	2.78100492588015
11	1.950947841633239E-003	4.15099119453381
13	3.744187117074755E-004	5.79205550254967
15	5.457417313918639E-005	7.70261022619612
17	6.041478145494365E-006	9.88080702716933

Powrót Poincaré

- dokładny



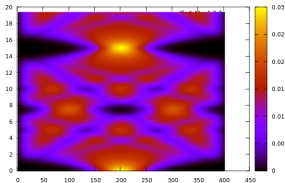
- do $n = 3$



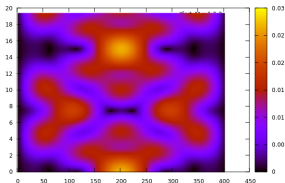
n	$ c_n $	$E(\text{meV})$
1	0.120911119468709	3.438881134222107E-002
2	1.283991472474891E-013	0.137546927627644
3	9.183006059675980E-002	0.309449397643555
5	5.296904332006864E-002	0.859304466893515
7	2.320480987763714E-002	1.68342206982430
9	7.720626353576380E-003	2.78100492588015
11	1.950947841633239E-003	4.15099119453381
13	3.744187117074755E-004	5.79205550254967
15	5.457417313918639E-005	7.70261022619612
17	6.041478145494365E-006	9.88080702716933

Powrót Poincaré

- dokładny



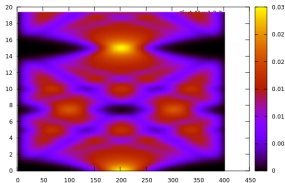
- do $n = 5$



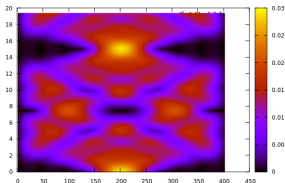
n	$ c_n $	$E(\text{meV})$
1	0.120911119468709	3.438881134222107E-002
2	1.283991472474891E-013	0.137546927627644
3	9.183006059675980E-002	0.309449397643555
5	5.296904332006864E-002	0.859304466893515
7	2.320480987763714E-002	1.68342206982430
9	7.720626353576380E-003	2.78100492588015
11	1.950947841633239E-003	4.15099119453381
13	3.744187117074755E-004	5.79205550254967
15	5.457417313918639E-005	7.70261022619612
17	6.041478145494365E-006	9.88080702716933

Powrót Poincaré

- dokładny



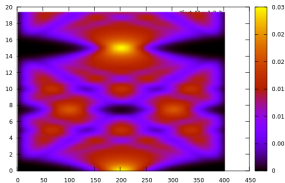
- do $n = 7$



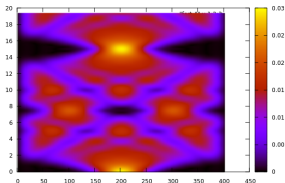
n	$ c_n $	$E(\text{meV})$
1	0.120911119468709	3.438881134222107E-002
2	1.283991472474891E-013	0.137546927627644
3	9.183006059675980E-002	0.309449397643555
5	5.296904332006864E-002	0.859304466893515
7	2.320480987763714E-002	1.68342206982430
9	7.720626353576380E-003	2.78100492588015
11	1.950947841633239E-003	4.15099119453381
13	3.744187117074755E-004	5.79205550254967
15	5.457417313918639E-005	7.70261022619612
17	6.041478145494365E-006	9.88080702716933

Powrót Poincaré

- dokładny



- do $n = 9$



n	$ c_n $	$E(\text{meV})$
1	0.120911119468709	3.438881134222107E-002
2	1.283991472474891E-013	0.137546927627644
3	9.183006059675980E-002	0.309449397643555
5	5.296904332006864E-002	0.859304466893515
7	2.320480987763714E-002	1.68342206982430
9	7.720626353576380E-003	2.78100492588015
11	1.950947841633239E-003	4.15099119453381
13	3.744187117074755E-004	5.79205550254967
15	5.457417313918639E-005	7.70261022619612
17	6.041478145494365E-006	9.88080702716933

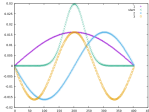
Powrót Poincaré

- między 7 a 9 - brak wyraźnej różnicy, zbieżność dla bazy z $n = 1, 3, 5, 7$
- $\Psi(x, t) = \sum_n c_n \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \psi_n(x)$,
 $E_n = E_1 n^2$
- $|\Psi(x, t)|^2 = \sum_n (|c_n|^2 |\psi_n(x)|^2) +$
 $2\Re \sum_{mn} (c_m c_n^* \psi_m \psi_n^* \exp(-i(E_m - E_n)t/\hbar))$
 $\Delta E_{mn} T = 2\pi \hbar, T = \frac{2\pi \hbar}{\Delta E_{mn}}$
- $\Delta_{mn} = (m^2 - n^2)E_1$ dla $m, n \in 1, 3, 5, 7$,
 $\Delta_{mn} \in \{8, 16, 24, 40, 48\}E_1$
- im większa Δ_{mn} tym szybsze oscylacje. Wszystkie α są ze zbioru są wielokrotnością 8.
- zobaczymy na poprzednich slajdach, że okres nie zmieniał się gdy dodawaliśmy kolejne wyrazy do bazy, rządzi superpozycja dwóch najniższych stanów
- dla $\Delta E_{12} = 8E_1 \rightarrow T = 15$ ps.

n	$ c_n $	$E(\text{meV})$
1	0.120911119468709	3.438881134222107E-002
2	1.283991472474891E-013	0.137546927627644
3	9.183006059675980E-002	0.309449397643555
5	5.296904332006864E-002	0.859304466893515
7	2.320480987763714E-002	1.68342206982430
9	7.720626353576380E-003	2.78100492588015
11	1.950947841633239E-003	4.15099119453381
13	3.744187117074755E-004	5.79205550254967
15	5.457417313918639E-005	7.70261022619612
17	6.041478145494365E-006	9.88080702716933

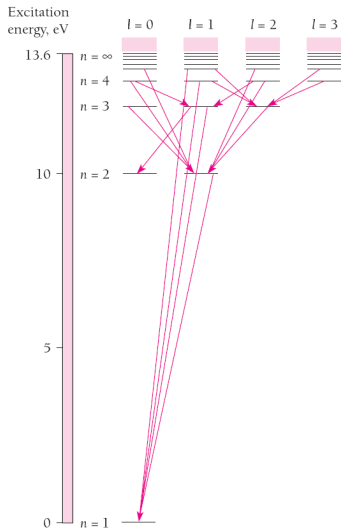
Przejścia

- Reguły wyboru dla układu 1D, symetria: parzystość



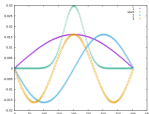
- $V' = V_0(x) + V(x, t) = V(x) + eF_0x \sin(\omega t)$
- $i\hbar \frac{\Psi(x, t+dt) - \Psi(x, t)}{dt} = \frac{1}{2}(H(t+dt)\Psi(x, t+dt) + H(t)\Psi(x, t))$
- $H = H_0 + V(x, t)$

przejścia promieniste

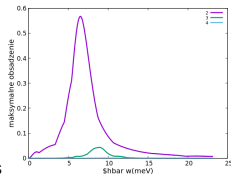


- najbardziej efektywne sprzężenie : dipolowe $\langle \Psi_m | x \Psi_n \rangle$, jego wartość decyduje o tempie relaksacji, które jest niezerowe gdy zmiana parzystości, $\Delta l = \pm 1$ oraz $\Delta m = 0, \pm 1$, (przejścia dozwolone, reguły wyboru dla przejść)
- pozostałe przejścia: zabronione wg reguł wyboru

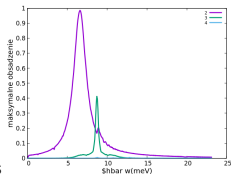
przejścia



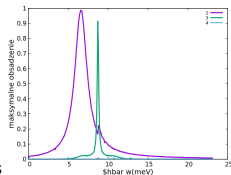
- $V' = V_0(x) + V(x, t) = V(x) + eF_0 x \sin(\omega t)$, $V(x)$ - studnia potencjału
- $H_0 \psi_n = E_n \psi_n$
- $H' = H_0 + V(x, t)$, $F_0 = 1$ kV/cm.
- $\Psi(x, t = 0) = \psi_1$, $E_n = E_1 \times n^2$, $E_0 = 2.2$ meV.
- $E_2 - E_1 = 6.6$ meV
- $E_3 - E_1 = 17.6$ meV, $17.6/2 = 8.3$ meV
- ustaliśmy ω , rozwiązujemy do T , patrzymy na maksymalny rzut na stany własne $|\langle \Psi(x, t) | \psi_n \rangle|^2$ (prawa strona)
- po prawej widzimy przejście jednofotonowe (fiolet) do pierwszego wzbudzonego.
- jednofotonowe do drugiego wzbudzonego jest zabronione przez reguły wyboru, lecz widać dwufotonowe



• 1.2ps



• 5 ps

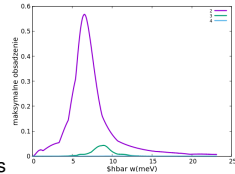


• 10 ps

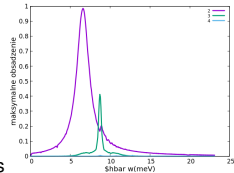
przejścia

- brak jednofotonowego do drugiego wzbudzonego, podobnie jak dwufotonowego do pierwszego wzbudzonego (symetria/reguły wyboru)
- jednofotonowe: $i \rightarrow k$: element macierzy przejścia $\langle \phi_i | x | \phi_k \rangle$
- dwufotonowe: $i \rightarrow n \rightarrow k$ elementy przejścia przez trzeci stan $\langle \phi_i | x | \phi_n \rangle \langle \phi_n | x | \phi_k \rangle$. Dwa fotony potrzebne, stąd ich energia $\hbar\omega$ dwukrotnie niższa niż różnica energii stanu początkowego i końcowego
- Przejście dwufotonowe do pierwszego wzbudzonego jest zabronione przez reguły wyboru - podobnie jak jednofotonowe do drugiego wzbudzonego

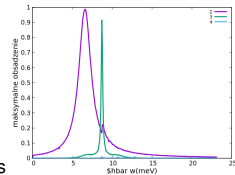
• 1.2ps



• 5 ps

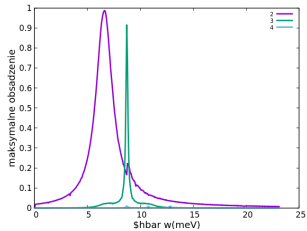
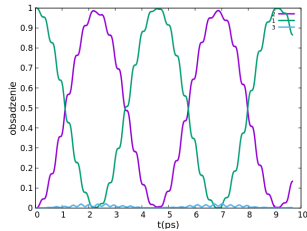


• 10 ps

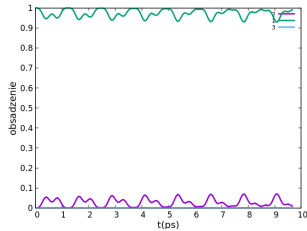


przejścia

- dla pików (6.6 meV)



- dla połowy (3.3 meV)



Rachunki w bazie funkcji własnych H_0

- $V(x, t) = eF_0x \sin(\omega t)$
- $H = H_0 + V(x, t)$
- $H_0\psi_n = E_n\psi_n$
-
- $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi(x, t)$ rozwiązanie dla $V = 0$
- $\Psi(x, t) = \sum_n c_n \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar})\psi_n(x)$
- rozwiązanie dla $V \neq 0$ - poszukiwane w bazie funkcji własnych H_0 (dobry pomysł, gdy V "małe")
- $\Psi(x, t) = \sum_n^{\infty} c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar})\psi_n(x)$
- zamiast rozwiązywać równanie Schroedingera na siatce różnicowej, poszukajmy jego rozwiązania w tej bazie, ustalmy górną granicę sumy, wyznaczmy $c_n(t)$

Rachunki w bazie funkcji własnych H_0

- znamy $H_0\psi_n = E_n\psi_n$
- problem zależny od czasu:
- $H = H_0 + V(x, t)$
- mamy rozwiązać: $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi(x, t)$
 $\Psi(x, t) = \sum_n^\infty c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar})\psi_n(x)$ - wstawić do R.S.:
- $i\hbar \sum_n^\infty \left(c_n'(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar})\psi_n(x) - \frac{iE_n}{\hbar} c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar})\psi_n(x) \right) = \sum_n^\infty (H_0 + V(x, t))c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar})\psi_n(x)$
- $i\hbar \sum_n^\infty c_n'(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar})\psi_n(x) = \sum_n^\infty V(x, t)c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar})\psi_n(x)$
- do tego miejsca brak przybliżeń

Rachunki w bazie funkcji własnych H_0

- $i\hbar \sum_n^\infty c'_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \psi_n(x) = \sum_n^\infty V(x, t) c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \psi_n(x)$
- do tego miejsca brak przybliżeń : pierwsze przybliżenie - skończona baza
- $i\hbar \sum_n^K c'_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \psi_n(x) \simeq \sum_n^K V(x, t) c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \psi_n(x) (*)$
- po ograniczeniu K mamy
- $R(x) = i\hbar \sum_n^K c'_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \psi_n(x) - \sum_n^K V(x, t) c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \psi_n(x)$
- chcemy aby residuum (reszta $R(x)$) była "mała" $R(x) \simeq 0$
- potrzebujemy sposobu na wyznaczenie $c_n(t)$ - tak aby $R(x) \simeq 0$ metoda kolokacji, metoda najmniejszych kwadratów, metoda reszt ważonych, metoda Galerkina
- wyrzutować równanie albo resztę $R(x)$ na elementy bazowe, zażądać znikania (ortogonalności błędu do bazy)

Rachunki w bazie funkcji własnych H_0

- $H = H_0 + V(x, t)$ rzutujemy
- $i\hbar \sum_n^K c'_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) |\psi_n(x)\rangle = \sum_n^K V(x, t) c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) |\psi_n(x)\rangle \Big| \times \langle \psi_k(x) |$
- $i\hbar \sum_n^K c'_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \langle \psi_k(x) | \psi_n(x) \rangle = \sum_n^K c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \langle \psi_k(x) | V(x, t) | \psi_n(x) \rangle$
- $i\hbar \sum_n^K c'_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \delta_{nk} = \sum_n^K c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) W_{kn}(t)$
- $i\hbar c'_k(t) = \sum_n^K c_n(t) \exp(-\frac{i(E_n - E_k)t}{\hbar}) W_{kn}(t)$
- problem algebraiczny z różniczkowego - do rozwiązania

Rachunki w bazie funkcji własnych H_0

- $H = H_0 + V(x, t)$, $H_0\psi_n = E_n\psi_n$
- $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi(x, t)$, $\Psi(x, t) = \sum_n^K c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar})\psi_n(x)$ - wstawić wyjdzie:
- $i\hbar \frac{dc_k(t)}{dt} = \sum_{n=1}^K c_n(t) W_{kn}(t) \exp(-i(E_n - E_k)t/\hbar)$ (*)
- $W_{kn}(t) = \langle \psi_k | V(x, t) | \psi_n \rangle$
- układ równań algebraicznych (*) rozwiązujemy np. metodą trapezów (odpowiednik CN)
-

$$\frac{c_k(t + dt) - c_k(t)}{dt} = \frac{1}{2i\hbar} \sum_n^K c_n(t) W_{kn}(t) \exp(-i(E_n - E_k)t/\hbar) \quad (2)$$
$$+ \frac{1}{2i\hbar} \sum_n^K c_n(t + dt) W_{kn}(t + dt) \exp(-i(E_n - E_k)(t + dt)/\hbar)$$

$$c_k(t + dt) - \frac{dt}{2i\hbar} \sum_n^K c_n(t + dt) W_{kn}(t + dt) \exp(-i(E_n - E_k)(t + dt)/\hbar) =$$
$$c_k(t) + \frac{dt}{2i\hbar} \sum_n^K c_n(t) W_{kn}(t) \exp(-i(E_n - E_k)t/\hbar) \quad (3)$$

Rachunki w bazie funkcji własnych H_0

$$c_k(t + dt) - \frac{dt}{2i\hbar} \sum_n^K c_n(t + dt) W_{kn}(t + dt) \exp(-i(E_n - E_k)(t + dt)/\hbar) = \quad (4)$$

$$c_k(t) + \frac{dt}{2i\hbar} \sum_n^K c_n(t) W_{kn}(t) \exp(-i(E_n - E_k)t/\hbar) \quad (5)$$

- wersja macierzowa $m_{kn} = -\frac{dt}{2i\hbar} W_{kn}(t + dt) \exp(-i(E_n - E_k)(t + dt)/\hbar)$
- wersja macierzowa $o_{kn} = \frac{dt}{2i\hbar} W_{kn}(t) \exp(-i(E_n - E_k)t/\hbar)$

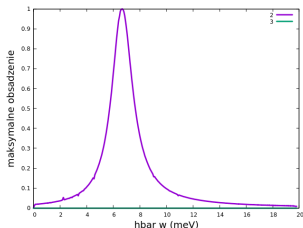
$$\bullet \begin{pmatrix} 1 + m_{11} & m_{12} & m_{13} & \dots & m_{1(N-1)} & m_{1N} \\ m_{21} & 1 + m_{22} & m_{23} & \dots & m_{2(N-1)} & m_{2N} \\ m_{31} & m_{32} & 1 + m_{33} & \dots & m_{3(N-1)} & m_{3N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ m_{N1} & m_{N2} & m_{N3} & \dots & m_{N(N-1)} & 1 + m_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(t + dt) \\ c_2(t + dt) \\ c_3(t + dt) \\ \dots \\ c_N(t + dt) \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 + o_{11} & o_{12} & o_{13} & \dots & o_{1(N-1)} & o_{1N} \\ o_{21} & 1 + o_{22} & o_{23} & \dots & o_{2(N-1)} & o_{2N} \\ o_{31} & o_{32} & 1 + o_{33} & \dots & o_{3(N-1)} & o_{3N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ o_{N1} & o_{N2} & o_{N3} & \dots & o_{N(N-1)} & 1 + o_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ \dots \\ c_N(t) \end{pmatrix}$$

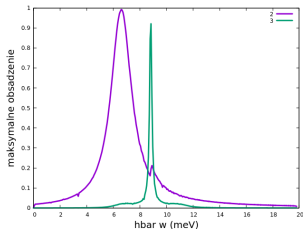
- macierz gęsta, ale mała

Przejścia - rachunek w bazie

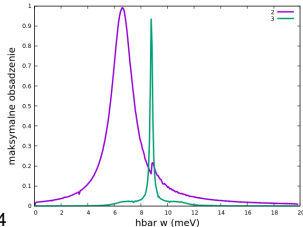
- $\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^K c_n \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \psi_n(x)$
- $K = 2$



- $K = 3$

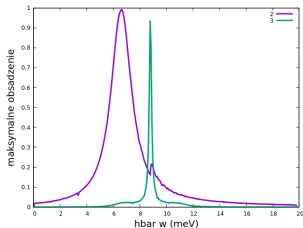


- $K =$



4

- $K = 6$



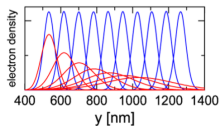
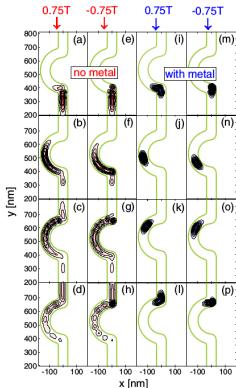
- tutaj zbieżność już dla 3 elementów w bazie (!) Krok czasowy wymaga rozwiązania równania 3x3 a nie np. 100x100 jak w metodzie różnicowej

Przejścia - rachunki w bazie

- $\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^K c_n \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \psi_n(x)$
- jeden krok czasowy: rozwiązanie układu równań 3×3 zamiast $N \times N$, gdzie pudło $L = Ndx$, np. 200.
- w 3D metoda różnic skończonych jest bardzo kosztowna obliczeniowo
- dla N cząstek mamy w MQ: $3D^N$ wymiarów (Feynmann- komputer Turinga nigdy tego nie obsłuży)
- informacja o rozkładzie przestrzennym - w funkcjach bazowych - tutaj funkcje własne H_0 , ale używane wiele różnych, dopasowanych do problemu, lub z ambicją do uniwersalności
- rachunek w bazie funkcyjnym - metody wariacyjne, metoda elementów skończonych
- metoda Galerkina dla bazy ogólnej

Przejścia - rachunki w bazie

- $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi(x, t)$
- widzieliśmy problem zaburzenia zmiennego od czasu
- $H = H_0 + V(x, t)$
- baza funkcji własnych H_0 dobra tj. szybkozbieżna, gdy $V(x, t)$ małe
- przykład skrajnie inny: pakiet elektronowy w drucie kwantowym. Nad drutem metalowa powierzchnia.

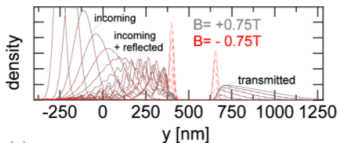


-
- R. Kalina, i inni Phys. Rev. Lett. **102**, 066807 (2009)
- metal - przez ładunek dodatni indukowany na powierzchni ogniskuje pakiet tak, że potencjał wytwarzany przez sam pakiet - do polczenia metodą obrazów, problem nieliniowy, nie ma mowy o $V(x, t)$ jako zaburzeniu
- potrzebna baza ogólna - bez założenia o H_0

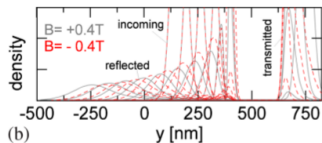
Przejścia - rachunki w bazie

- $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H(x, t)\Psi(x, t)$
- $\Psi = \sum_n^K c_n(t)f_n(x)$ gdzie baza funkcji f_n nie spełnia żadnych założeń poza tym, iż tworzą zbiór funkcji liniowo niezależnych
- $i\hbar \sum_n^K c_n'(t)f_n(x) = \sum_n^K c_n(t)H(x, t)f_n(x)$ rzutowanie (metoda Galerkina) na f_m
- $i\hbar \sum_n^K S_{mn}c_n'(t) = \sum_n^K H_{mn}c_n(t)$ rzutowanie (metoda Galerkina)
- $S_{mn} = \langle f_m | f_n \rangle$,
- $H_{mn} = \langle f_m | H f_n \rangle$ rozwiążemy metodą AK
- $i\hbar \sum_n^K S_{mn} \frac{c_n(t+dt) - c_n(t-dt)}{2dt} = \sum_n^K H_{mn}c_n(t)$
- albo CN
- $i\hbar \sum_n^K S_{mn} \frac{c_n(t+dt) - c_n(t)}{dt} = \frac{1}{2} \sum_n^K (H_{mn}c_n(t) + H_{mn}c_n(t + dt))$

Przejścia - rachunki w bazie

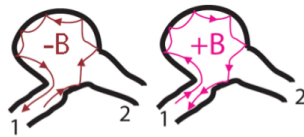


(a)



(b)

- górą: pakiet bez metalu, na dole - pakiet samozogniskowany



- (a)
- $T(B) = T(-B)$ ponieważ $T + R = 1$ oraz $R(B) = R(-B)$ - relacja mikroodwracalności

Przejścia - wyniki rachunki zaburzeń

- $V' = V_0(x) + V(x, t)$
- $V(x, t) = eF_0 x \sin(\omega t)$
- $i\hbar \partial \Psi / \partial t = H \Psi$
- $H = H_0 + V(x, t)$
- $H_0 \psi_n = E_n \psi_n$
- rozwiązanie dla $V = 0$
- $\Psi(x, t) = \sum_n c_n \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \psi_n(x)$
- rozwiązanie dla $V \neq 0$ - poszukiwane w bazie funkcji własnych H_0 (dobry pomysł, gdy V "małe")
- $\Psi(x, t) = \sum_n c_n(t) \exp(-\frac{iE_n t}{\hbar}) \psi_n(x)$
- rachunek przybliżony dla $c_n(t)$ dla słabego V , tzw. rachunek zaburzeń

Slajdy z pakietów falowych w pierścieniu

- przykład: rozpad β^+ a orbita elektronowa
- ${}^5\text{B} \rightarrow {}^4\text{He} + e^+ \nu_e$
- to nie wyszło: niech będzie jakiś knock out ze wybity proton i z 2 na 1
- zakładamy, że w stanie początkowym jądro boru wiązało jeden tylko elektron
- albo lepiej - pole elektryczne !!! zimna emisja
- ale to dupa - odstawiamy
- zamiast tego jest gaussian nie ma gaussiana albo nic
- w stanie początkowym i końcowym układ ma symetrię sferyczną
- $H = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z}{r} = -\frac{1}{2}\frac{1}{r^2} \left(2r\frac{\partial}{\partial r} + r^2\frac{\partial^2}{\partial r^2} + L^2(\theta, \phi)/\hbar^2 \right) - \frac{Z}{r}$
- $H_{l=0} = -\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{Z}{r}$
- przy rozpadzie Z zmieni się z 5 do 4
- ewolucja funkcji falowej wymaga podania warunków brzegowych. wartość na jądrze będzie zmieniać z czasem, aby pozbyć się tej zależności: funkcja pomocnicza $\Psi = \frac{\psi(r)}{r}$, gdzie $\Psi(r)$ to funkcja falowa, a ψ funkcja dla której wykonamy rachunki

$$\bullet H\Psi = -\frac{1}{2}\frac{1}{r}\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} - \frac{Z}{r}\frac{\psi}{r} = \frac{1}{r} \left(-\frac{1}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} - \frac{Z}{r}\psi \right) = \frac{1}{r}h\psi$$

$$\bullet i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = H\Psi$$

$$\bullet i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = h\psi$$

$$\bullet \text{warunek początkowy } Z = 2: \Psi(r, t = 0) = \sqrt{2}\exp(-r)$$

$$\bullet \text{czyli } \psi(r, t = 0) = \sqrt{2}r\exp(-r)$$

$$\bullet \text{w } t = 0 \text{ następuje } Z : 1 \rightarrow 2$$