

Квантовые часы.

(25 баллов)

Решите уравнение Шрёдингера в двойной потенциальной яме. Описание задачи: http://theor.mephi.ru/wiki/index.php?title=%D0%9A%D0%B2%D0%B0%D0%BD%D1%82%D0%BE%D0%B2%D1%8B%D0%B5_%D1%87%D0%B0%D1%81%D1%8B

Временное уравнение Шрёдингера имеет форму уравнения теплопроводности, с той лишь разницей, что 1) коэффициенты и искомая функция комплексные, 2) накладывается дополнительное требование сохранения нормировки волновой функции.

Это приводит к изменениям в поведении конечно-разностных схем (см. лекцию 3).

Задание:

1. Реализуйте схему Кранка-Николсона для одномерного уравнения Шрёдингера в произвольном потенциале.
2.
 - Напишите функцию, позволяющую задавать начальное состояние в виде гауссова волнового пакета.
 - Проведите моделирование свободного распространения такого пакета (во всяком случае, вдали от границ области моделирования) и сопоставьте аналитическими результатами (эволюцию свободно распространяющегося гауссова пакета можно описать точно).
 - Представьте результат в виде анимации эволюции квадрата модуля и действительной и мнимой частей волновой функции (или серии графиков, соответствующим разным моментам времени).
 - Постройте график зависимости нормировки волновой функции от времени. Если схема К-Н реализована верно, нормировка должна сохраняться с высокой точностью.
3. Проведите моделирование (а) прохождения пакета через потенциальный барьер в виде ступеньки; (б) эволюцию пакета в достаточно глубокой потенциальной яме (когда будете представлять результаты, нарисуйте яму на одном графике с волновой функцией).
 - Поэкспериментируйте с параметрами задачи (ширина пакета, волновое число, размеры шагов сетки по времени и координатам). Попробуйте найти параметры, при которых из-за взаимодействия с границами потенциала решение будет терять устойчивость даже при выполнении условия Куранта (например, нормировка волновой функции перестанет сохраняться и начнёт резко возрастать).
4. Реализуйте схему ромба (см. основной текст задания по ссылке выше) и решите уравнение Шрёдингера в потенциале на выбор с помощью неё.

5. Смоделируйте квантовые часы с помощью одной из схем.

- Рассмотрите двойную прямоугольную яму. Выберите форму начального состояния по желанию (например, можно сделать гауссов волновой пакет из состояний, соответствующих одиночной прямоугольной потенциальной яме, или суперпозицию основного и первого возбуждённого состояний в двойной яме), главное, чтобы волновая функция была полностью локализована в одной из двух ям. Основная часть задания заключается в подборе параметров сетки и начального состояния таким образом, чтобы 1) решение было устойчивым, 2) волновая функция плавно перетекала из одной ямы в другую. Для этого стенка между двумя ямами должна быть малой, как и характерное волновое число начального состояния, иначе квантовые “часы” не будут работать.
- Смоделируйте квантовые часы в “плавной” яме, как на втором рисунке в описании задачи по ссылке.