 AGH	<b>Akademia Górniczo-Hutnicza</b> <b>Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej</b> <b>Fizyka Techniczna</b> <b>Metody Obliczeniowe Fizyki i Techniki 2</b>	<b>Zrealizował:</b> Ryś Przemysław
Rok akademicki: 2022/2023	Semestr VI	Grupa laboratoryjna nr 2
Temat projektu: Lab 3: Równanie Schrödingera zależne od czasu		
Data wykonania ćwiczenia 15.11.2023	Data oddania sprawozdania 17.11.2023	Ocena

## Wstęp

W ramach projektu skupiłem się na rozwiązaniu równania Schrödingera zależnego od czasu metodą Askara (równanie 1).

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

Będę korzystać z języka Python oraz odpowiednich wbudowanych bibliotek numerycznych pythona, wymagane funkcje deklarowałem zaś sam.

Wszystkie obliczenia wykonywane są w jednostkach atomowych.

## Zadanie 1

```
@njit
def nextPsi(psi):
    return psi * np.exp(-1j * hw * 0.5 * dt)

@njit
def HPsi(psi, x):
    temp = np.zeros(len(psi), dtype=np.complex128)
    for i in range(1, len(x)-1):
        temp[i] = (-1/(2*m)) * (psi[i+1] + psi[i-1] - 2 * psi[i])/(dx**2) + (0.5 * m * hw**2 * x[i]**2) * psi[i]
    return temp

@njit
def psiAskar(psi, x, t):
    for i in range(2, t):
        psi[i, :] = psi[i-2, :] + 2 * HPsi(psi[i-1, :], x) / 1j
    return psi
```

Rys. 1: Fragment kodu implementujący metodę Askara

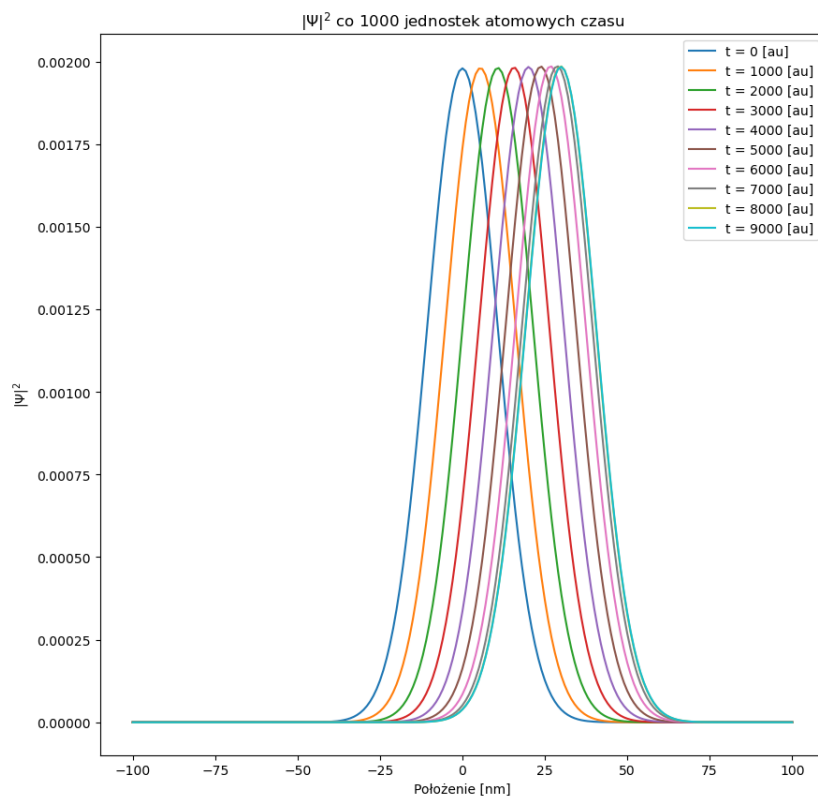
## Zadanie 2

W wyniku normowania uzyskałem wartość współczynnika C wynoszącą 22.47578070254822.

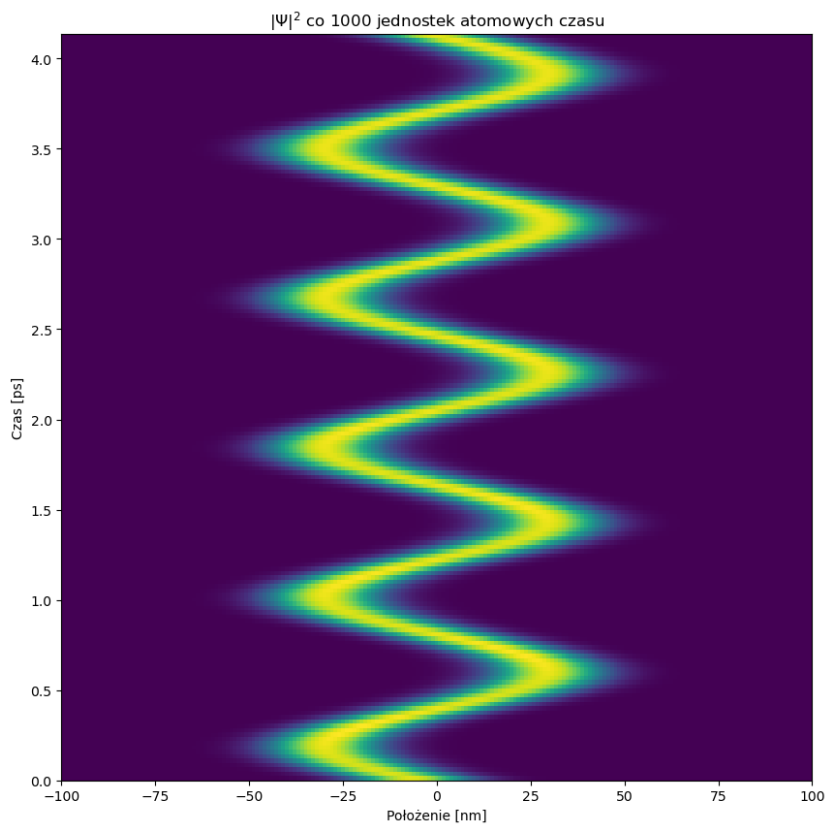
Wartość funkcji w kolejnym kroku czasowym wyznaczyłem korzystając z funkcji *nextPsi* z rysunku 1.

## Zadanie 3

wartość początkowego położenia ustawiona została na  $x_0 = 30\text{nm} = \frac{30}{0.05292}\text{au}$

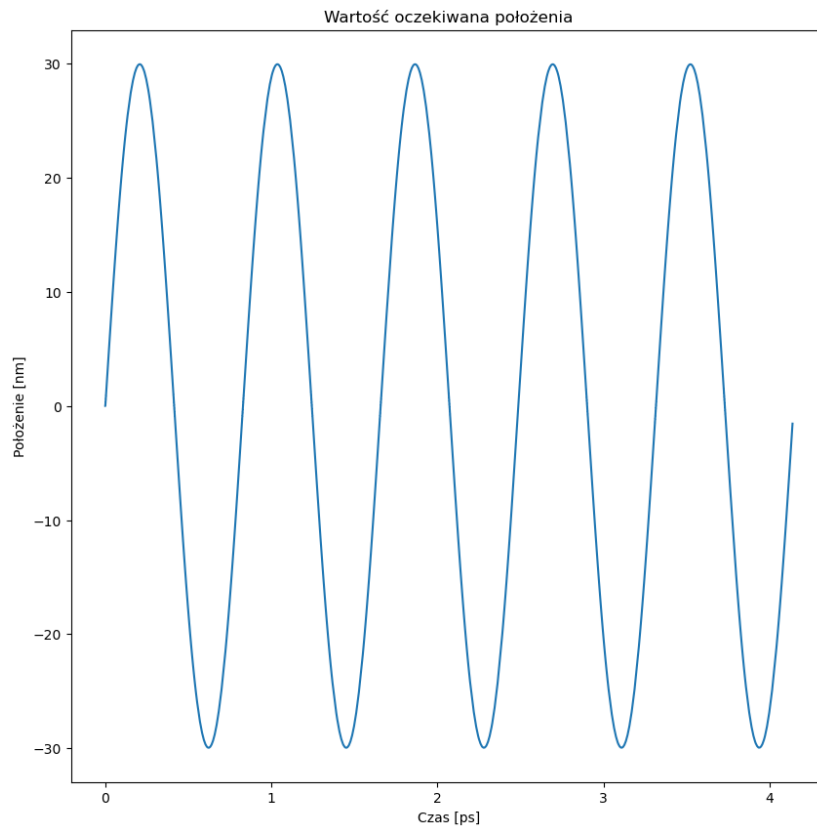


Rys. 2: Wykres gęstości prawdopodobieństwa w 10 różnych krokach czasowych oddległych co 1000 dla  $x_0 = 30\text{nm}$

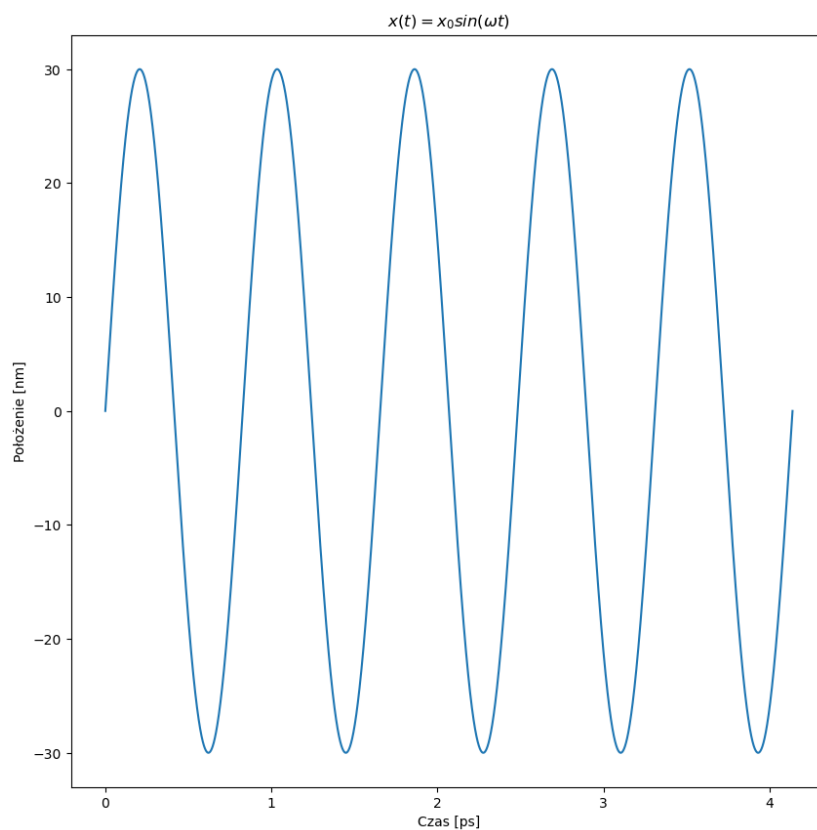


Rys. 3: Wykres gęstości prawdopodobieństwa na siatce wszystkich położeń i co tysięcznych czasów dla  $x_0 = 30\text{nm}$

## Zadanie 4



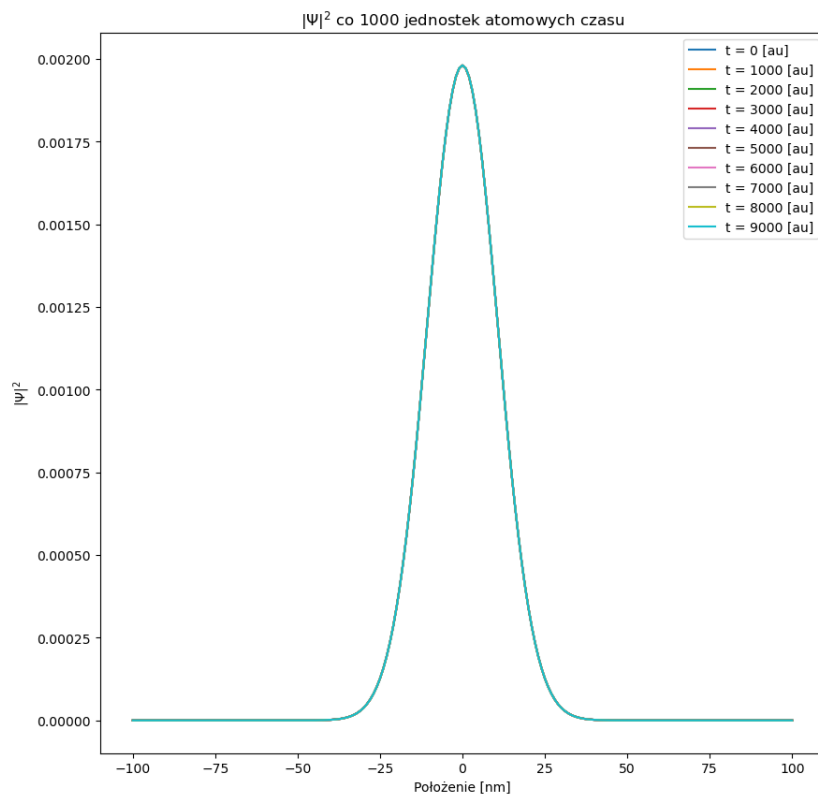
Rys. 4: Wartość oczekiwana położenia w funkcji czasu dla symulacji



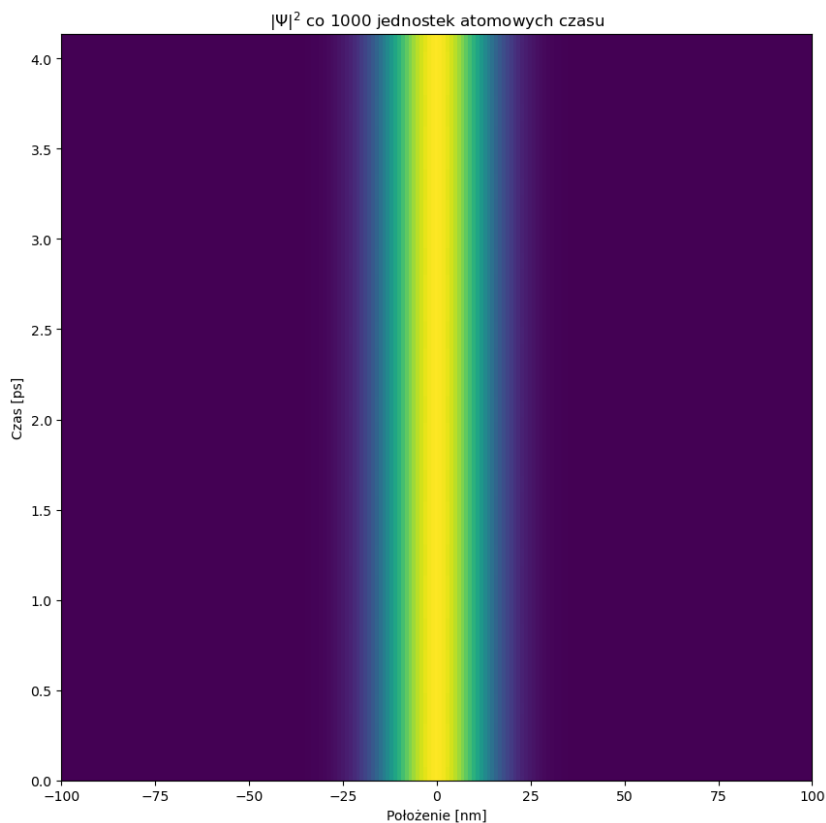
Rys. 5: Wartość oczekiwana położenia w funkcji czasu dla odpowiednika klasycznego

## Zadanie 5

wartość początkowego położenia ustawiona została na  $x_0 = 0\text{nm} = 0\text{au}$



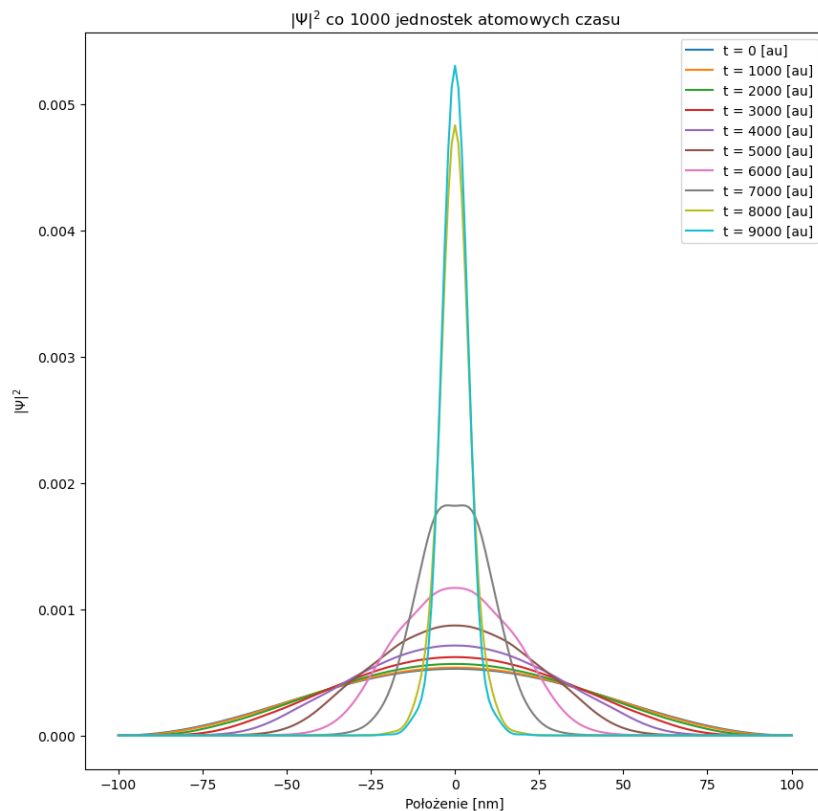
Rys. 6: Wykres gęstości prawdopodobieństwa w 10 różnych krokach czasowych oddległych co 1000 dla  $x_0 = 0\text{nm}$



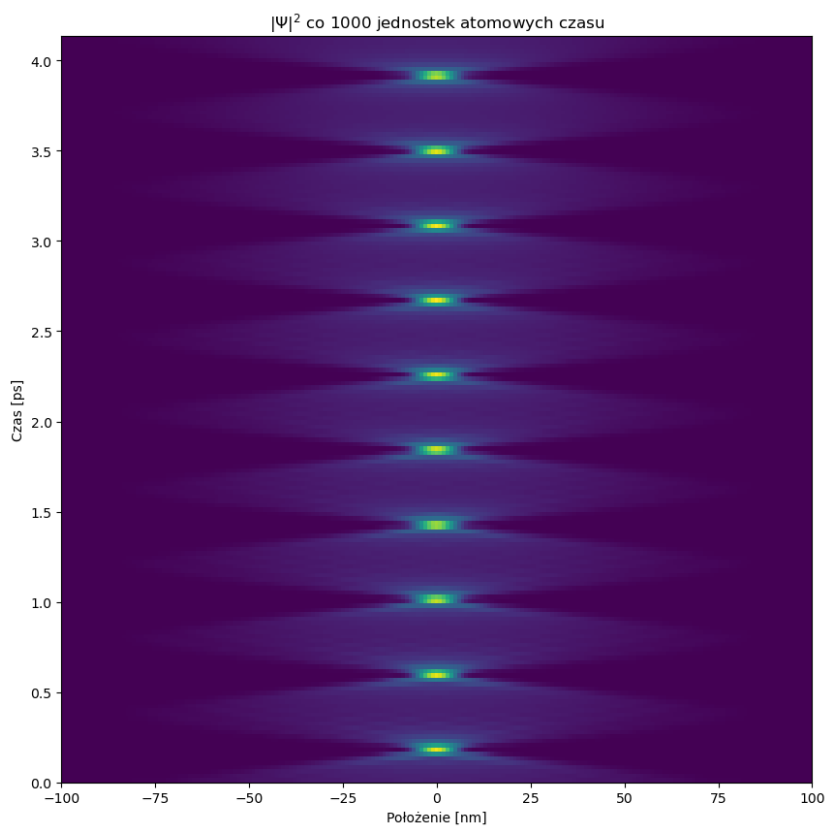
Rys. 7: Wykres gęstości prawdopodobieństwa na siatce wszystkich położeń i co tysięcznych czasów dla  $x_0 = 30\text{nm}$

Z powyższych rysunków 6, 7 można zauważyć, że gęstość prawdopodobieństwa jest stała w czasie.

## Zadanie 6



Rys. 8: Wykres gęstości prawdopodobieństwa w 10 różnych krokach czasowych odległych co 1000 dla nieskończonej studni potencjału



Rys. 9: Wykres gęstości prawdopodobieństwa na siatce wszystkich położeń i co tysięcznych czasów dla nieskończonej studni potencjału

Z powyższych rysunków 8, 9 można zauważyć, że gęstość prawdopodobieństwa oscyluje przyjmując maksimum w środku pudła w pewnych chwilach czasowych, w innych natomiast rozprasza się ona po całej szerokości pudła znikając na barierze.