Домашнее задание №7. Решение эволюционной задачи в скалированных координатах

Александр Козлов

19 декабря 2022 г.

Формулировка задания

Рассматривается временное уравнение Шрёдингера (УШ) $i\partial_t\Psi = \mathrm{H}\Psi$ с начальным условием $\Psi(k, t=0) = \exp\bigl(-(k-k_0)^2\bigr)$, где k — волновое число (в атомных единицах — в которых мы работаем — тождественно импульсу). Необходимо воспроизвести свбодную (то есть $\mathrm{H} = -\nabla^2$ в атомарных единицах) динамику гауссовского волнового пакета с использованием скалированных координат.

1 Аналитическое решение

В начальный момент времени $t = 0$ волновая функция в импульсном пространстве имеет вид

$$\Psi(k, t=0) = \exp\bigl(-(k-k_0)^2\bigr),$$

где k — волновое число (в атомных единицах — в которых мы работаем — тождественно импульсу). Гамильтониан свободного пространства в импульсном пространстве имеет вид

$$\mathrm{H} = k^2,$$

поэтому решение времянного УШ в импульсном пространстве легко написать. Оно будет иметь вид:

$$\Psi(k,t) = \exp\left(-ik^2t - (k-k_0)^2\right). \tag{1}$$

В прострвенных координатах x такая волновая функция будет иметь вид:

$$\Psi(x,t) = C\cdot\int \mathrm{d}k \exp\left(ikx - ik^2t - (k-k_0)^2\right) = C\cdot\sqrt{\frac{\pi}{it+1}}\exp\left(\frac{(2k_0+ix)^2}{4(it+1)} - k_0^2\right), \tag{2}$$

где C — некоторый нормировочный множитель. Выберем C таким образом, чтобы $\|\Psi(x,t=0)\|^2 = 1$. Тогда $C = (2\pi^3)^{-1/4}$ и аналитическое решение имеет вид:

$$\Psi(x,t) = \sqrt[4]{\frac{1}{2\pi}}\sqrt{\frac{1}{it+1}}\exp\left(\frac{(2k_0+ix)^2}{4(it+1)} - k_0^2\right). \tag{3}$$

2 Решение эколюционной задачи в скалированных координатах

Исходное одномерное УШ имеет вид $i\partial_t\Psi(x,t) = -\partial_{xx}\Psi(x,t)$. Делаем замену переменных $x = R(t)\xi$ и переходим к уравнению

$$i\partial_t\Phi = \mathrm{H}_\xi\Phi, \quad \mathrm{H}_\xi = -\frac{1}{R^2}\partial_{\xi\xi} + \frac{1}{4}R(t)\ddot{R}(t)\xi^2 \tag{4}$$

на волновую функцию $\Phi(\xi,t)$, связанную с волновой функцией исходной задачи соотношением

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{R}}\exp\left[-\frac{i}{4}\dot{R}(t)R(t)\xi^2(x,t)\right]\Phi(\xi(x,t),t). \tag{5}$$

Видно, что уравнение на новую волновую функцию эквивалентно УШ с время зависящим гамильтонианом. Эволюционную задачу будем решать, используя следующую аппроксимацию оператора эволюции:

$$U(t_2, t_1) = \exp\left[-i\int_{t_1}^{t_2} \mathrm{H}_\xi \,\mathrm{d}t\right] \approx \exp\left[-i\,\mathrm{H}_\xi\left(\frac{t_1 + t_2}{2}\right) \cdot (t_2 - t_1)\right]. \tag{6}$$

В качестве $R(t)$ была взята функция $R(t) = \sqrt[4]{1 + \gamma^4 t^4}$, где γ имеет смысл скорости.

3 Связь волновой функции в скалированных координатах со волновой функцией исходной задачи в импульсном представлении

В работе [1] приводится связь волновой функции в скалированных координатах со волновой функцией исходной задачи в импульсном представлении, которую для плотности вероятности можно записать следующим образом:

$$|\Psi(k,t)|^2 = \frac{2}{\gamma}\left|\Phi(\xi = \frac{2k}{\gamma}, t)\right|^2, \quad \left|\Psi(k = \frac{\xi\gamma}{2}, t)\right|^2 = \frac{2}{\gamma}|\Phi(\xi, t)|^2. \tag{7}$$

4 Результаты и сопоставление численного решения с аналитическим

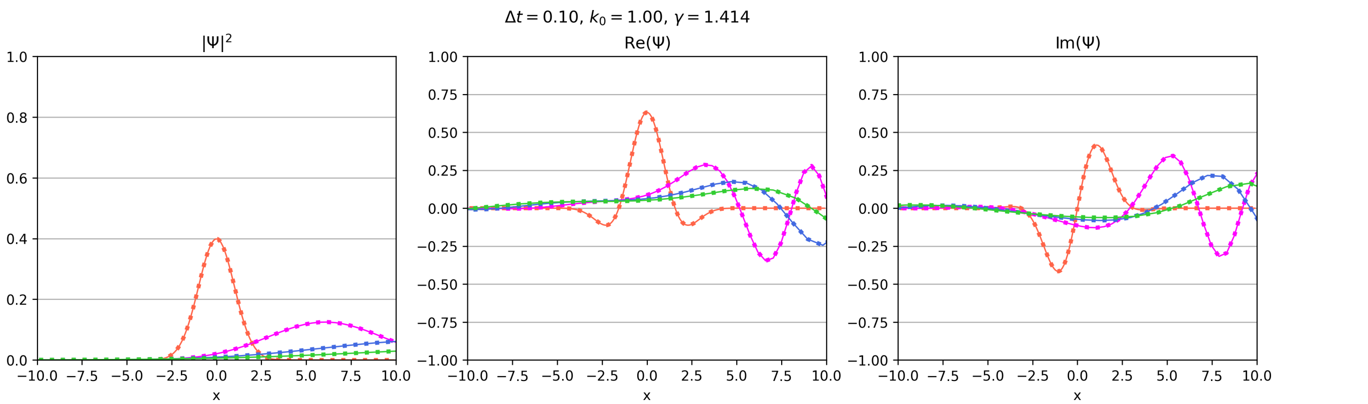

Рис. 1: Сравнение численного и аналитических решений. Точки соответствуют численному решению, а непрервная линия — аналитическому. Красный цвет обозначает волновые функции при $t = 0$, маджента — при $t = 0.3$, королевский голубой — при $t = 0.6$ и лаймовый зеленый — при $t = 0.9$.

Список литературы

[1] Vladimir Roudnev and B. D. Esry. HD^+ photodissociation in the scaled coordinate approach. *Phys. Rev. A*, 71:013411, Jan 2005.

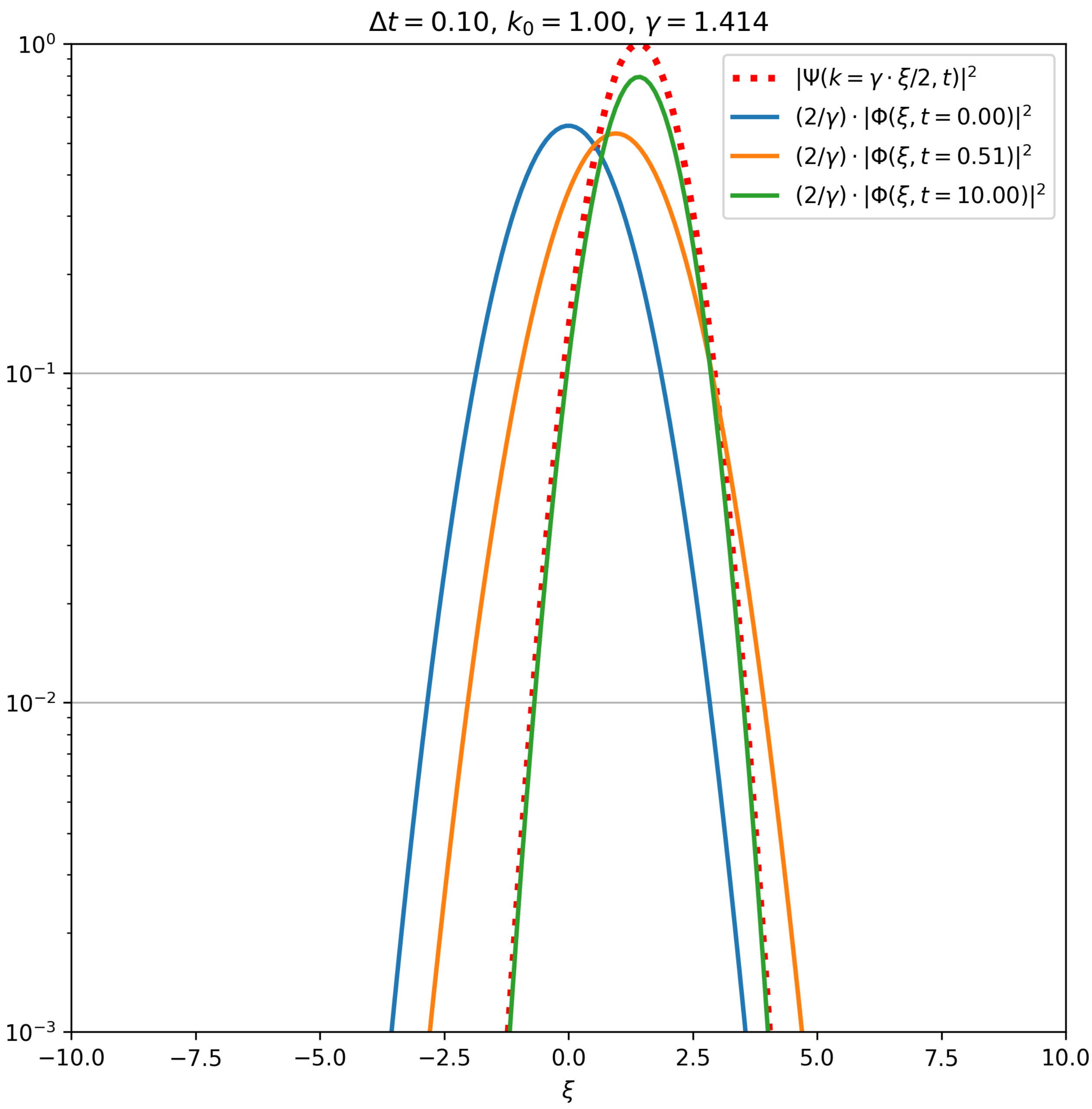

Рис. 2: Сравнение плотностей вероятности в импульсных представлениях.