# Домашнее задание №6. Динамика гауссовского волнового пакета на фиксированном промежутке с использованием маскирующей функции

Александр Козлов

5 декабря 2022 г.

## Формулировка задания

Рассматривается временное уравнение Шрёдингера $i\partial_t \Psi = H\Psi$ с начальным условием

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

где $k$ — волновое число (в атомных единицах — в которых, мы, собственно, и работаем — тождественно импульсу). Необходимо воспроизвести свбодную (то есть $H = -\nabla^2$ в атомарных единицах) динамику гауссовского волнового пакета на фиксированном промежутке с использованием маскирующей функции $M(x)$ и сравнить численное решение с аналитическим.

## 1 Решения задачи с использованием маскировочной функции

### Сетка

Прежде всего зададим равномерную сетку

$$x_0 = -R,\ x_1 = x_0 + \delta,\ x_2 = x_0 + 2\delta,\ \ldots,\ x_k = x_0 + k\delta,\ \ldots,\ x_M = x_0 + M\delta = R \tag{1}$$

с шагом $\delta = 2R/M$, где $M$ — целое положительное число, а $R$ — положительное действительное число.

### Маскировочная функция

В качестве маскировочной функции возьмём такую:

$$M(x) = \exp\left[-\left(\frac{x}{R-\delta_M}\right)^{10}\right]. \tag{2}$$

### 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:

$$\Psi(k, t) = \exp\left(-ik^2 t - (k-k_0)^2\right). \tag{3}$$

В прострвенных координатах $x$ такая волновая функция будет иметь вид:

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

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:

$$\Psi(x,t) = \sqrt[4]{\frac{1}{2\pi}} \sqrt{\frac{1}{it+1}} \exp\left(\frac{(2k_0+ix)^2}{4(it+1)} - k_0^2\right). \tag{5}$$

### Итерационная последовательность волновых функций

Для решения задачи строим итерационную последовательность волновых функций, обозначать которые будем через $\Psi_n^{(M)}(x \in [-R,\, R])$, где $n$ — номер шага по времени. Волновая функция $\Psi_n^{(M)}(x)$, полученная предложенным алгоритмом решения, является приближением точного решения $\Psi(x,\, t=n\tau)$, где $\tau$ — шаг по времени. Последовательность функций $\left\{\Psi_n^{(M)}(x)\right\}_{n=0}^{N}$ формируется следующим образом:

$$\begin{aligned}
\Psi_0^{(M)}(x) &= M(x)\,\Psi(x,t=0), \\
\Psi_1^{(M)}(x) &= M(x)\,e^{-iH\tau}\Psi_0^{(M)}(x), \\
&\dots \\
\Psi_n^{(M)}(x) &= M(x)\,e^{-iH\tau}\Psi_{n-1}^{(M)}(x), \\
&\dots \\
\Psi_N^{(M)}(x) &= M(x)\,e^{-iH\tau}\Psi_{N-1}^{(M)}(x).
\end{aligned} \tag{6}$$

Оператор эволюции $e^{-iH\tau}$, выбрав шаг по времени достаточно малым, можно расчитывать используя Паде-апрроксимацию.

## 2 Результаты и сопоставление численного решения с аналитическим

На Рис. 1 проводится сравнение численного и аналитических решений, видно, что при расплывании волновой функции, когда на границах бокса значения истинной волновой функции начинают сильно отличаться от нулевых, численное решение перестает повторять аналитическое. Это связанно с наличием масировочной функции, которая насильно зануляет близкие к границам бокса значения волновой функции.

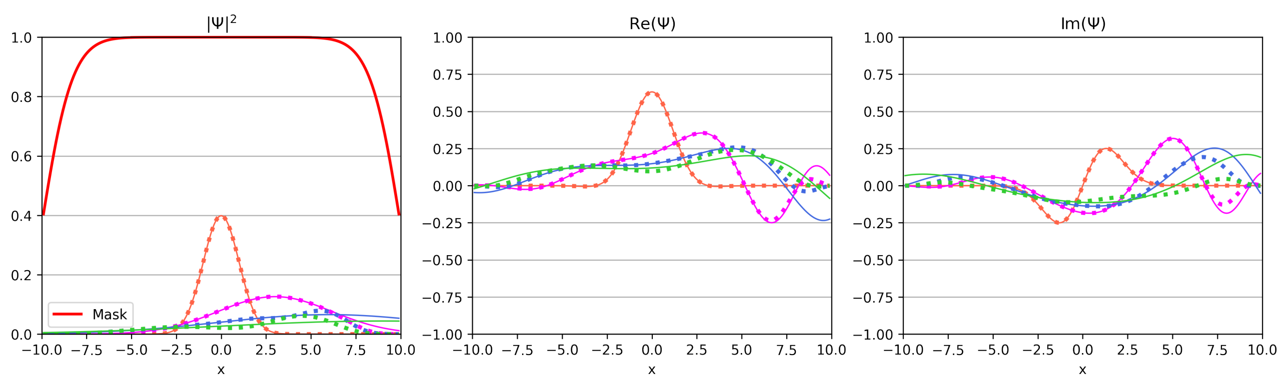


Рис. 1: Сравнение численного и аналитических решений. Красный цвет обозначает волновые функции при $t = 0$, маджента — при $t = 0.3$, королевский голубой — при $t = 0.6$ и лаймовый зеленый — при $t = 0.9$. Шаг по времени $\Delta t = 0.1$, а импульс волновой функции $k_0 = 0.5$.