Домашнее задание №7. Решение эволюционной задачи в скалированных координатах

Александр Козлов

5 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:

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

В пространвенных координатах x такая волновая функция будет иметь вид:

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

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 времязависящим гамильтанианом. Эволюционную задачу будем решать, используя следующую аппроксимацию оператора эволюции:

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

3 Результаты и сопоставление численного решения с аналитическим

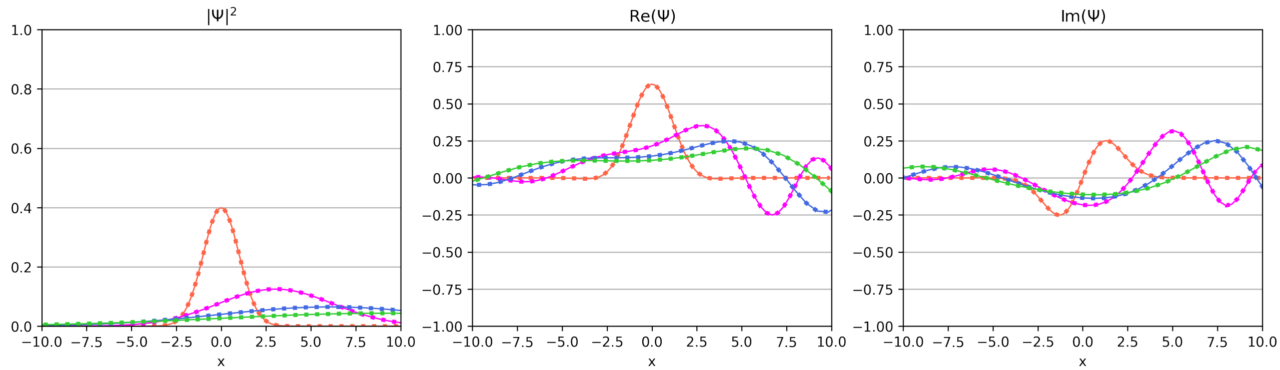

Рис. 1: Сравнение численного и аналитических решений. Точки соответсвуют численному решению, а непрервная линия — аналитическому. Красный цвет обозначает волновые функции при $t = 0$, маджента — при $t = 0.3$, королевский голубой — при $t = 0.6$ и лаймовый зеленый — при $t = 0.9$. Шаг по времени $\Delta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