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

Александр Козлов

8 ноября 2022 г.

Формулировка задания

Рассматривается временное уравнение Шрёдингера $i\partial_t \Psi = H\Psi$ с начальным условием $\Psi(k, t = 0) = \exp\left(-k^2\right)$, 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:

$$M(x) = \begin{cases} -\dfrac{2}{\delta_M^3}(x + R - \delta_M)^3 - \dfrac{3}{\delta_M^2}(x + R - \delta_M)^2 + 1, & x \in (-R,\ -R + \delta_M); \\ 1, & x \in (-R + \delta_M,\ R - \delta_M); \\ \dfrac{2}{\delta_M^3}(x - R + \delta_M)^3 - \dfrac{3}{\delta_M^2}(x - R + \delta_M)^2 + 1, & x \in (R - \delta_M,\ R) \end{cases} \tag{2}$$

Начальное условие

Начальное условие задано в виде функции импульса, нормированной таким образом, что $\int \mathrm{d}k \left|\Psi(k, t = 0)\right|^2 = \sqrt{\pi/2}$. Однако, мы планируем решать задачу в координатном представлении, поэтому следует получить начальное условие в координатном представлении, для чего делаем преобразование Фурье и получаем

$$\Psi(x, t = 0) = c_1 \int \mathrm{d}k\, e^{ikx}\, \Psi(k, t = 0) = c_1 \int \mathrm{d}k\, e^{-k^2 + ikx} = c_1\sqrt{\pi}\, e^{-x^2/4}, \tag{3}$$

где c_1 — нормировочный коэффициент. Выберем c_1 таким образом, чтобы волновая функция была нормирована на 1

$$c_1^2 \pi \sqrt{2\pi} = 1, \quad c_1 = 2^{-1/4}\pi^{-3/4}. \tag{4}$$

Отсюда следует, что начальное условие в координатном представлении имеет вид

$$\Psi(x,\, t=0) = \frac{e^{-x^2/4}}{\sqrt[4]{2\pi}}. \tag{5}$$

Аналитическое решение

В ходе лекционных занятий было получено аналитическое решение задачи, оно имеет вид:

$$\Psi(x,\, t) = \frac{e^{-x^2/4(1+it)}}{\sqrt[4]{2\pi}\sqrt{1+it}}. \tag{6}$$

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 τ — шаг по времени. Последовательность функций $\left\{\Psi_n^{(M)}(x)\right\}_{n=0}^{N}$ формируется следующим образом:

$$\begin{aligned}
\Psi_0^{(M)}(x) &= M(x)\, \Psi(x, t=0), \\
\Psi_1^{(M)}(x) &= M(x)\, e^{-iH\tau} \Psi_0^{(M)}(x), \\
&\dots \\
\Psi_n^{(M)}(x) &= M(x)\, e^{-iH\tau} \Psi_{n-1}^{(M)}(x), \\
&\dots \\
\Psi_N^{(M)}(x) &= M(x)\, e^{-iH\tau} \Psi_{N-1}^{(M)}(x).
\end{aligned} \tag{7}$$

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