1 Динамика свободного волнового пакета

1.1 Постановка задачи

В качестве модели задачи исследовалась динамика свободного гауссова волнового пакета. Гамильтониан системы, в импульсном представлении, уравнение Шредингера, и гауссов пакет в импульсном представлении (с точностью до нормировки) выглядят следующим образом:

$$H = k^2; \qquad i\frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi; \qquad \Psi_0(k) = \exp(-k^2)$$

Поставленные задачи:

- Смоделировать динамику волнового пакета.
- Применить маскировочную функцию для подавления отражений от границы.

1.2 Эволюция пакета

Решив уравнение Шредингера гамильтонианом, который не зависит от времени, получаем выражение для волновой функции от импульса и времени:

$$\Psi(k,t) = \exp(-ik^2t)\Psi_0(k)$$

и применив преобразование Фурье получим для координатного представления:

$$\Psi(k,t) = \frac{1}{\sqrt{1+it}}\exp(-\frac{x^2}{4(1+it)})$$

что будем далее называть аналитическим решением. (с точностью до нормировки).

Численное решение вычислялось на сетке времен, с шагом τ при помощи оператора эволюции $\exp(-i\tau H)$, где H - гамильтониан задачи в координатном представлении, представляющий собой оператор кинетической энергии, как:

$$\Psi(x, t+\tau) = \exp(-i\tau H)\Psi(x,t)$$

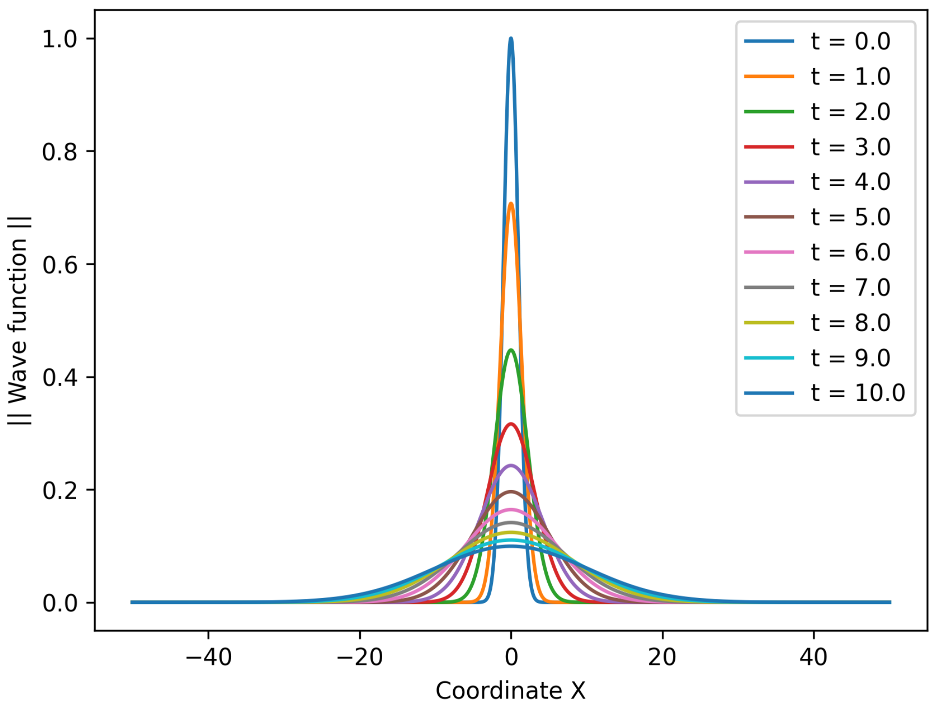

Рис. 1: Пример аналитический эволюции, расплывания волнового пакета

Численная эволюция волнового пакета. Размер бокса: 10; Чисто узлов сетки: 100.

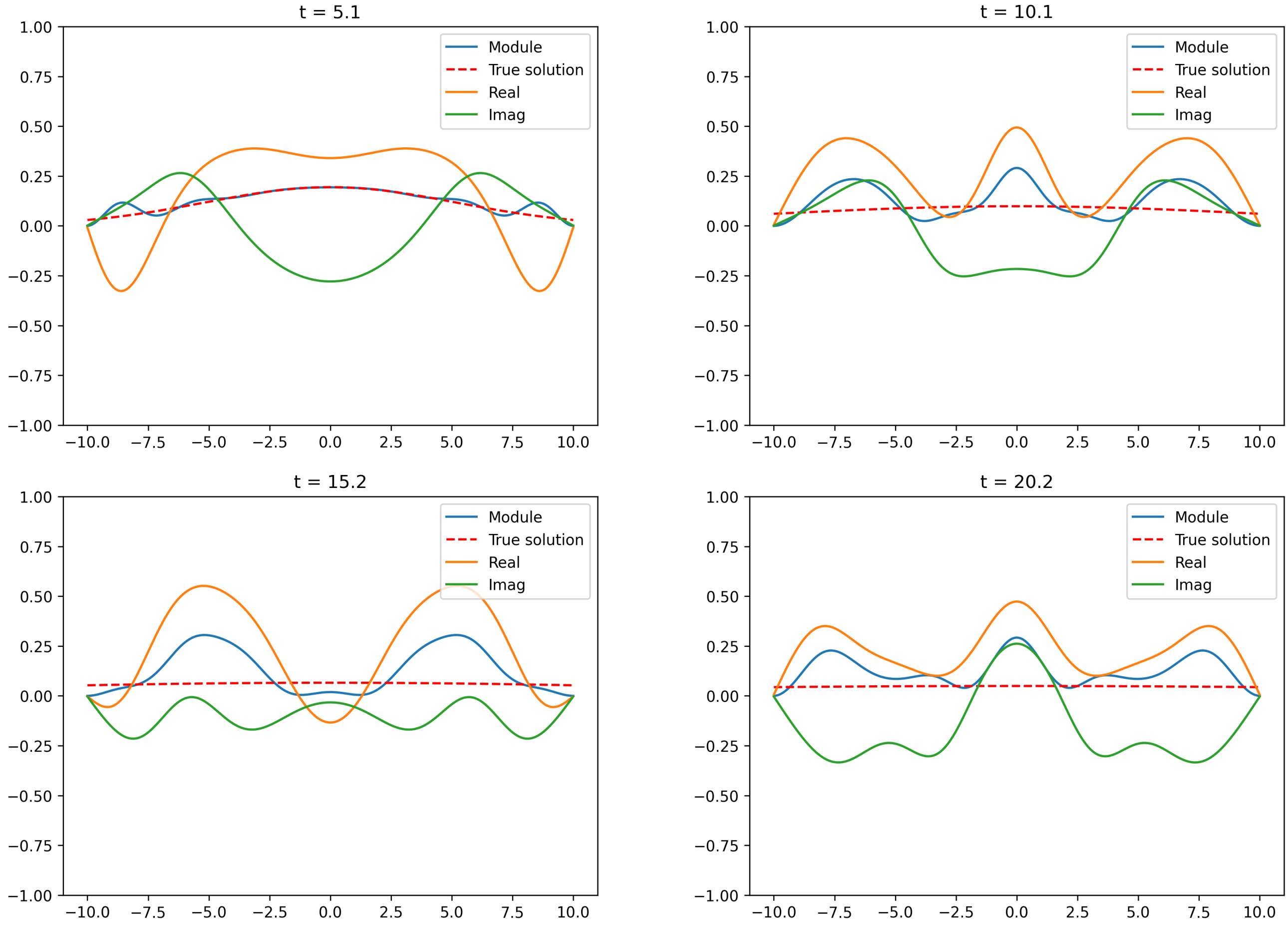

Рис. 2: Пример численной эволюции волнового пакета при шаге по времени $\tau = 0.5$

1.3 Подавление отражений от границы при помощи маскировочной функции

Для того, чтобы волновая функция не колебалась так сильно, используется маскировочная функция M (пример представлен на Рис. 3), которая представляет собой константу, с плавным спуском, полиномом третьей степени.

$$\Psi(x, t + \tau) = \exp(-i\tau H)\Psi(x, t)$$

Численная эволюция волнового пакета, с наложением маски. Размер бокса: 10; Чисто узлов сетки: 100.

Полные анимации эволюции представлены отдельно в формате gif файлов.

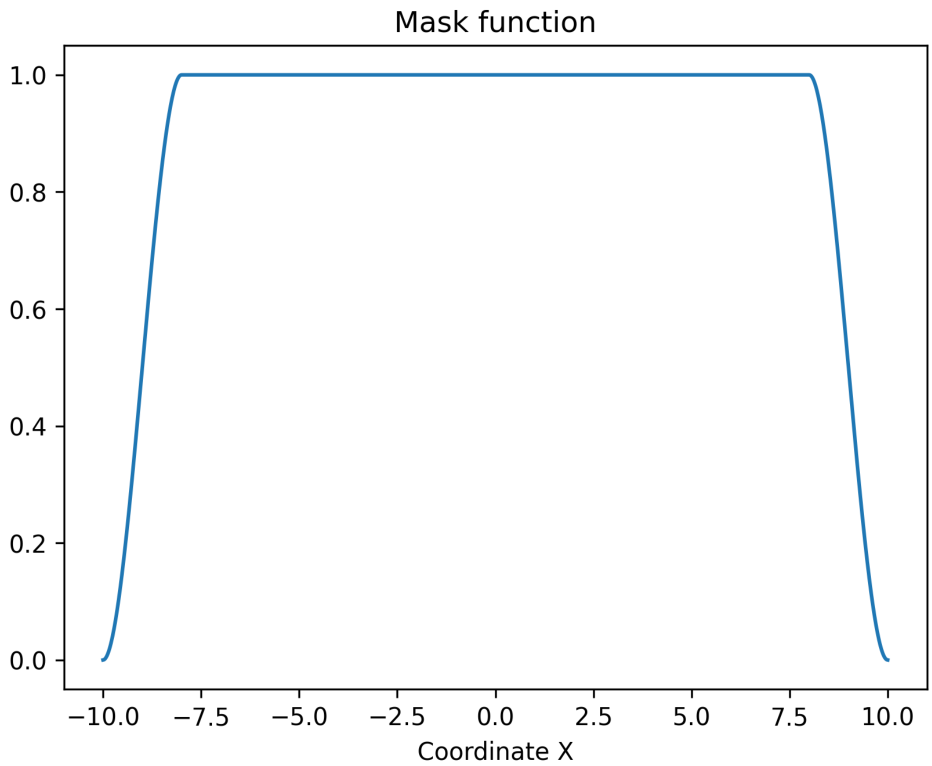

Рис. 3: Пример эволюции, расплывания волнового пакета

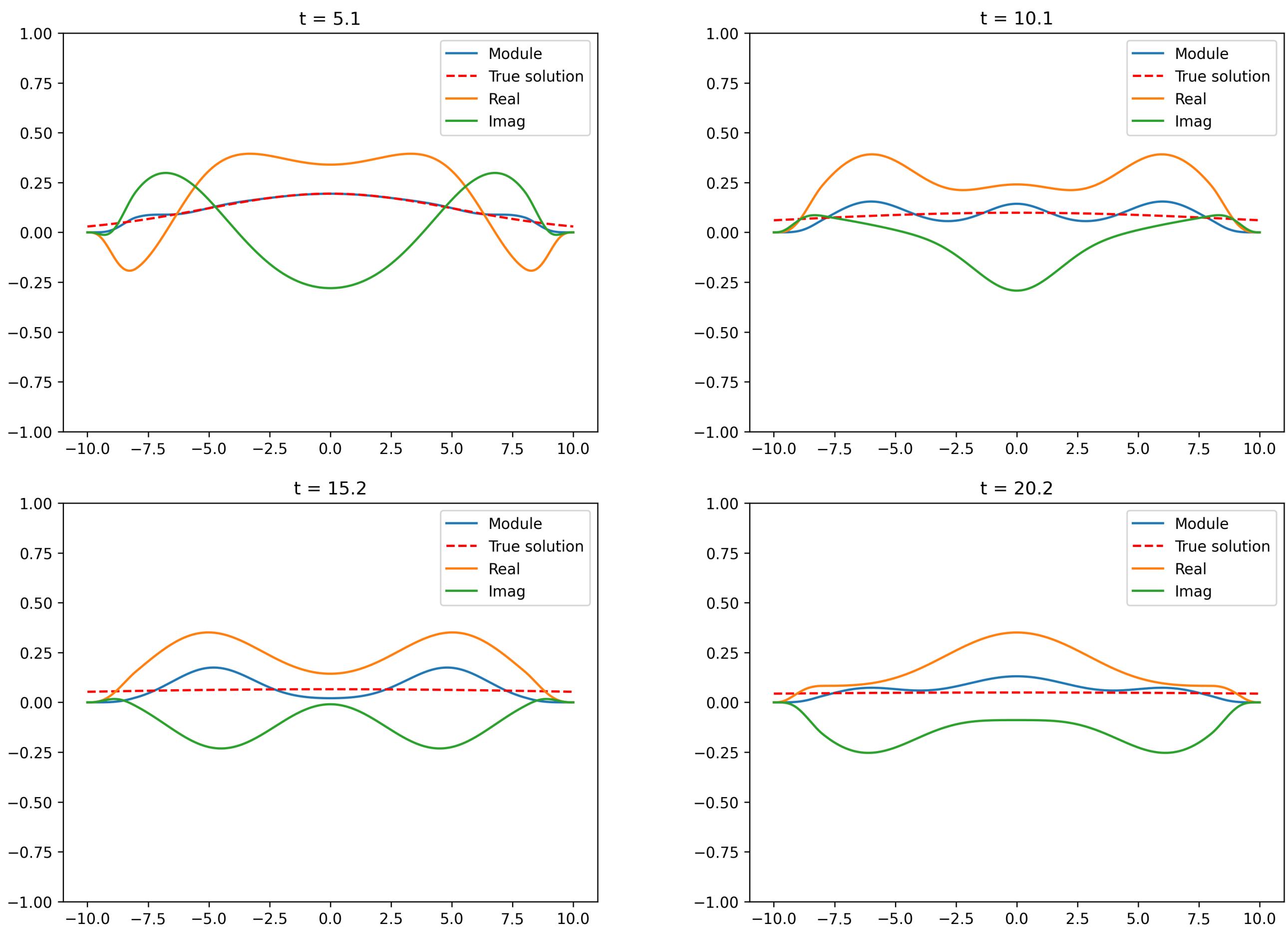

Рис. 4: Пример численной эволюции волнового пакета при шаге по времени $\tau = 0.5$