1 Динамика свободного волнового пакета в скалированных координатах

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).

1.2.1 Скалированные координаты

Скалированные координаты ξ, τ связаны с x, t следующим образом:

$$x = R(t)\xi; \qquad t = \tau$$

При переходе в эти координаты уравнение Шрёдингера приобретает вид (без учета потенциала):

$$i\frac{\partial}{\partial \tau}\Phi(\xi) = [-\frac{1}{R^2}\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{4}\ddot{R}R\xi^2]\Phi(\xi)$$

А волновая функция $\Phi(\xi, \tau)$ связана с $\Psi(x,t)$ соотношением:

$$\Phi(\xi,\tau) = \sqrt{R(t)}\exp\frac{i}{4}\dot{R}(t)R(t)\xi^2$$

Функция R, имеет следующий вид:

$$R(t) = \begin{cases} 1, \quad t \le t_0 - \Delta t \\ P_3(t), \quad t_0 - \Delta \le t \le t_0 + \Delta t \\ (1-\gamma t_0) + \gamma t, \quad t \ge t_0 + \Delta t \end{cases}$$

где коэффициенты полинома определяются из непрерывности функции и первой производной, а остальные величины взяты $\gamma = 5; t_0 = 2; \Delta t = 1$

Численная эволюция волнового пакета. Размер бокса: 10; Чисто узлов сетки: 1000.

Аналогичные графики, включая вещественную и мнимую части.

Полные анимации эволюции представлены отдельно в формате gif файлов.

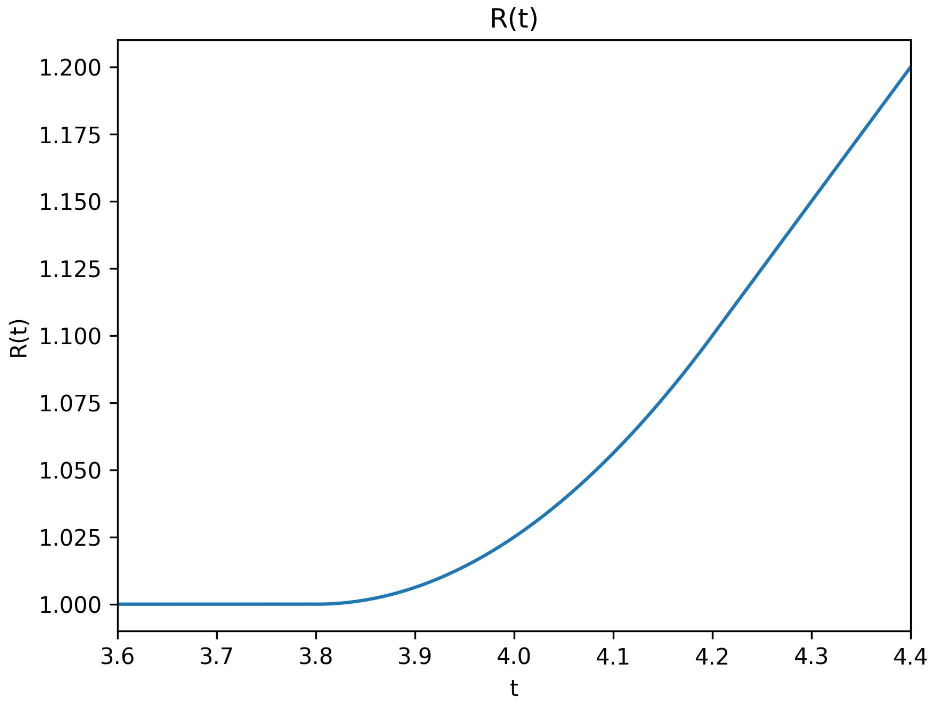

Рис. 1: Переход функции R(t) из константы в линейный рост

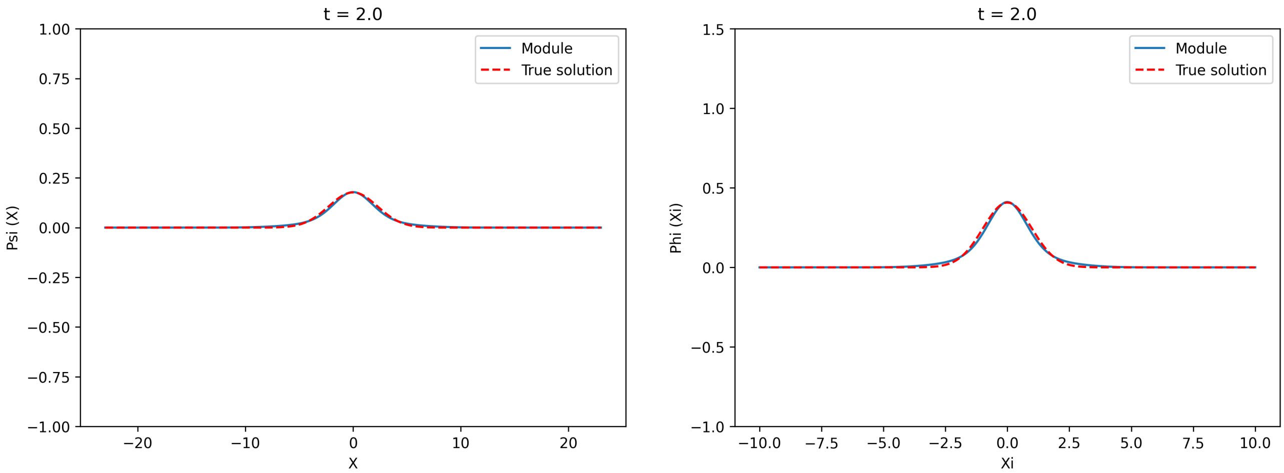

Рис. 2: Численная эволюция волновой функции. В исходных (слева) и скалированных (справа) координатах.

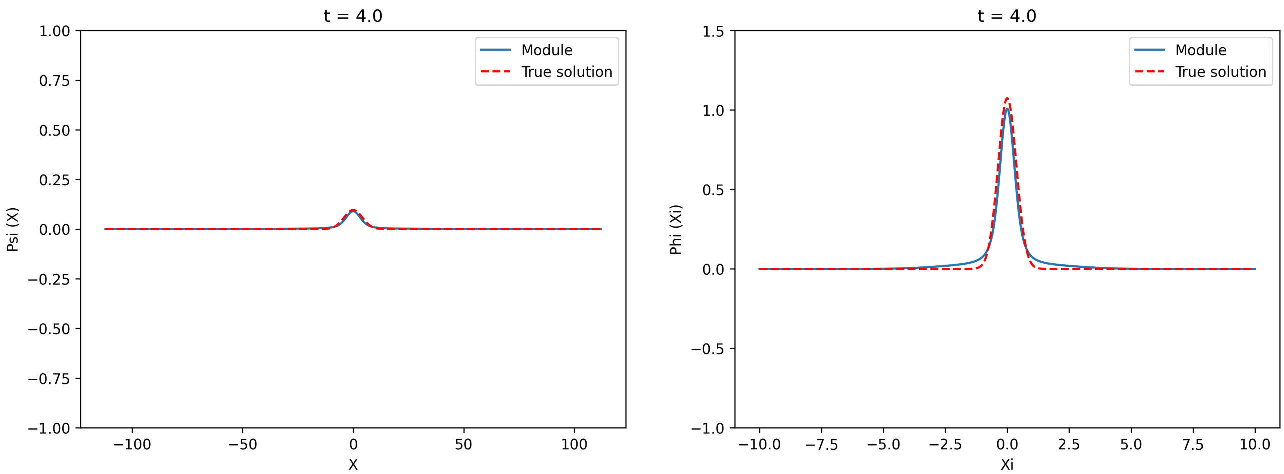

Рис. 3: Численная эволюция волновой функции. В исходных (слева) и скалированных (справа) координатах.

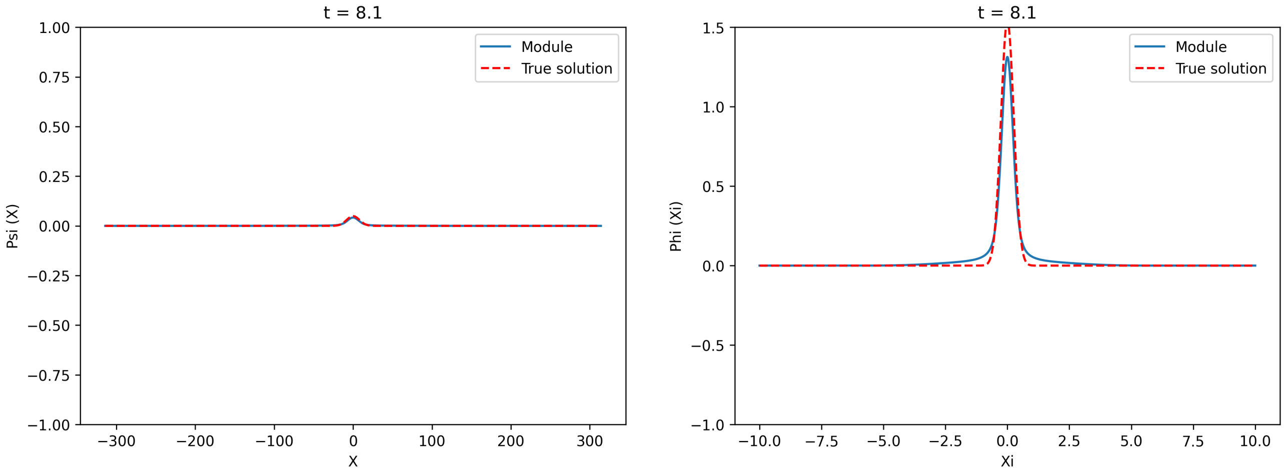

Рис. 4: Численная эволюция волновой функции. В исходных (слева) и скалированных (справа) координатах.

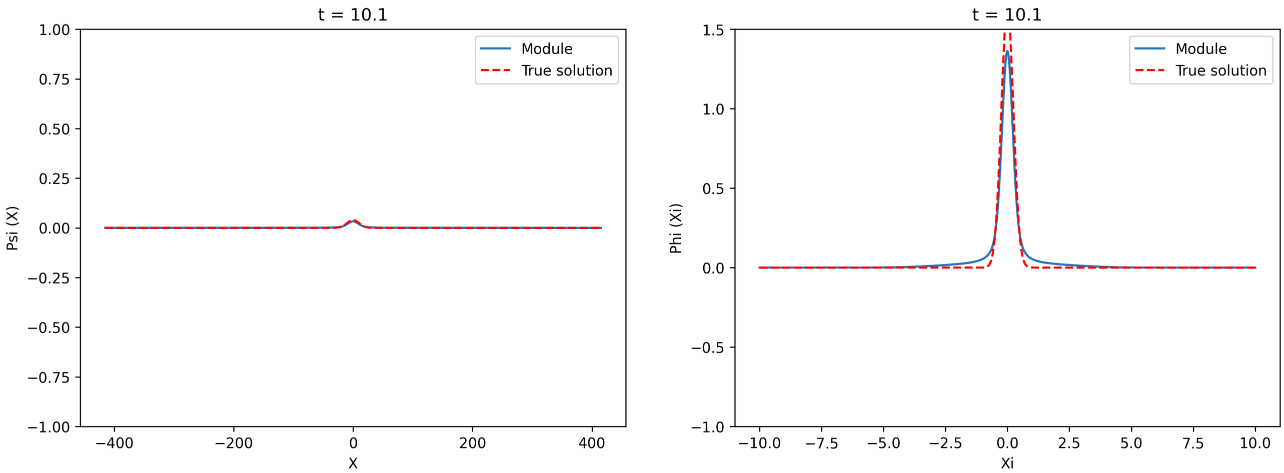

Рис. 5: Численная эволюция волновой функции. В исходных (слева) и скалированных (справа) координатах.

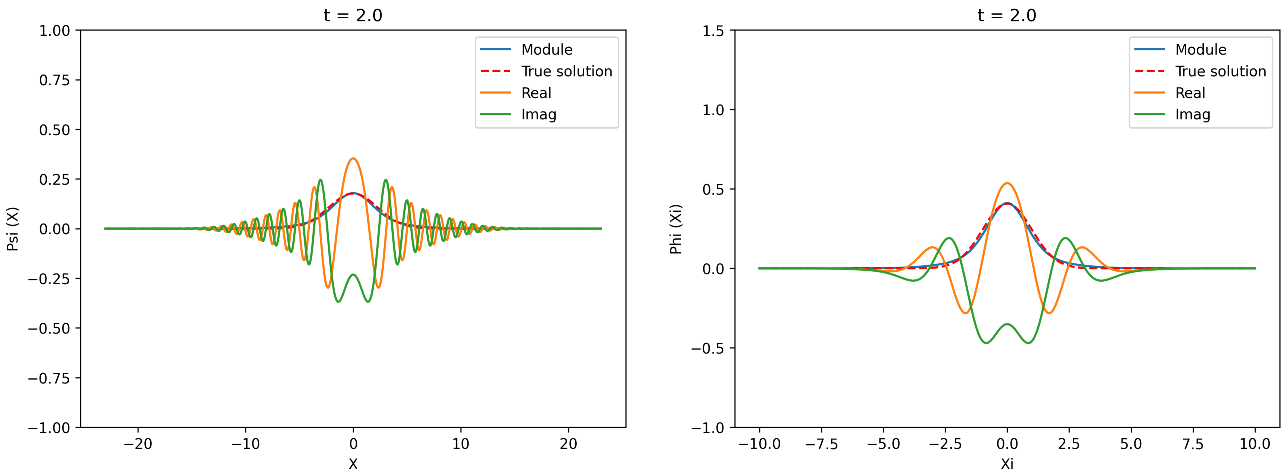

Рис. 6: Численная эволюция волновой функции. В исходных (слева) и скалированных (справа) координатах.

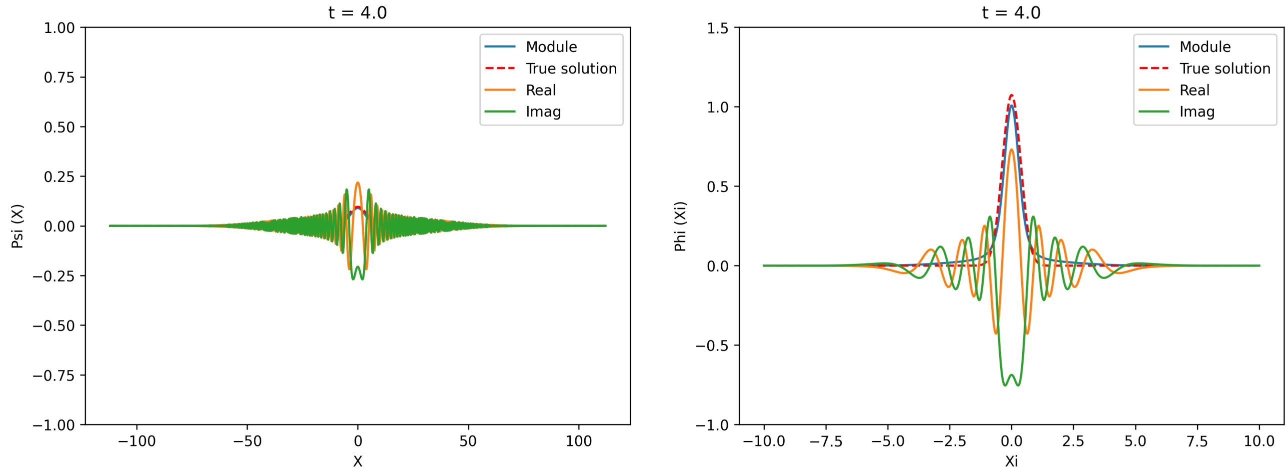

Рис. 7: Численная эволюция волновой функции. В исходных (слева) и скалированных (справа) координатах.

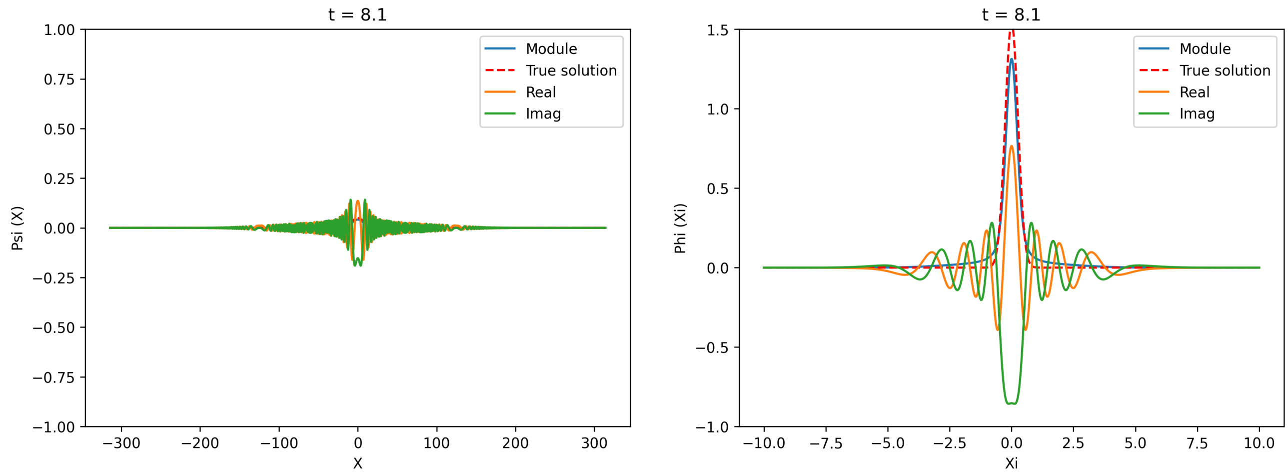

Рис. 8: Численная эволюция волновой функции. В исходных (слева) и скалированных (справа) координатах.

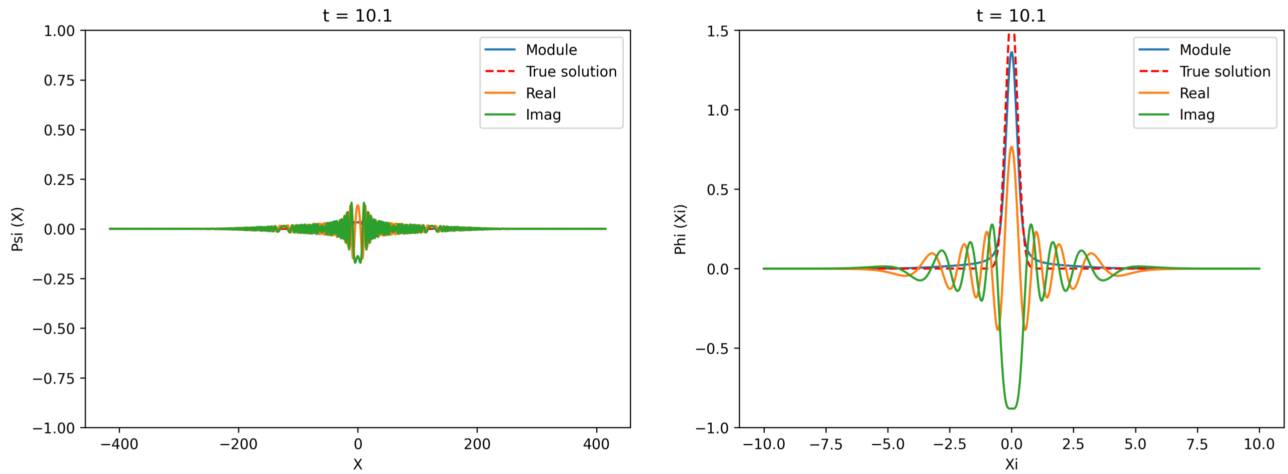

Рис. 9: Численная эволюция волновой функции. В исходных (слева) и скалированных (справа) координатах.