

Spis treści

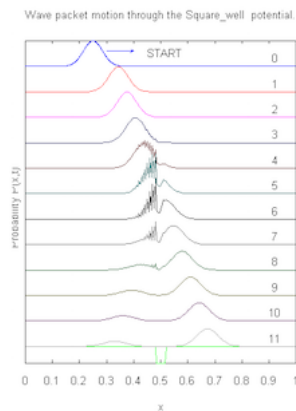
1 Ruch paczki falowej	1
2 Leapfrog method	2
3 Metoda NCGF rozwiązywania równania Schrödingera	5

TEMAT: ZALEŻNE OD CZASU RÓWNANIE SCHRÖDINGERA. RUCH PAKIETÓW FALOWYCH. WARTOŚCI WŁASNE.
PRZYKŁADY PROGRAMÓW W JAVATM.

Podstawa: Internet

1 Ruch paczki falowej

Poniższy rysunek przedstawia stary sposób ilustrowania zjawiska ruchu paczki falowej w zadanym potencjale (w tym przypadku nad studnią prostokątną).



Ruch pakietu falowego.

Teraz możemy zrobić to lepiej.

Oto, jak np. robi to John L. Richardson z Silicon Graphics.

a tak Denis Rapaport:

Które przedstawienie jest lepsze? Wydaje się, że ostatnia, chociaż jeśli chcemy obejrzeć niektóre szczegóły ...

2 Leapfrog method

Jak możemy to zrealizować sami? Ponieważ nie jesteśmy pierwsi, zobaczmy co zrobili inni.

Można skorzystać z metody opracowanej przez Visschera, [P.B. Visscher, *Comp. in Phys.*, **5** (1991) 596-598], którą można znaleźć także u Horbatscha [Horbatsch, QM]. [The time stepping algorithm is described also in: Richardson, John L., Visualizing quantum scattering on the CM-2 supercomputer, *Computer Physics Communications* **63** (1991) pp 84-94]. Diabli wiedzą kto był pierwszy. Dobrze jest zajrzeć do klasyków mechaniki kwantowej: L. Schiff, *Mechanika kwantowa*, wyd. PWN, Warszawa, 1977, str.102 oraz rozdział 12. Schiff cytuje też pracę z 1967r: A. Goldberg, H.M. Schey. J.L. Schwartz, Computer-Generated Motion Pictures of One-Dimensional Quantum Mechanical Transmission and Reflection Phenomena, *Am. J. Phys.*, **35** (1967) 177. Jeszcze jedną interesującą publikacją jest: Galbraith, Ching, Abraham, *Am. J. Phys.* **52**, (1984) 60-68.

Metoda nosi nazwę *leap frog* czyli żabiego skoku. Polega ona na tym, że zespolona funkcja falowa $\psi = \psi_R + \psi_I$, jest zadana w chwili t_0 i jej ewolucja, zgodnie z czasowym równaniem Schrödingera, wyznaczana jest poprzez obliczenia, na zmianę, raz wartości ψ_R , a raz ψ_I w kolejnych chwilach $t_0 + \Delta t/2$, $t_0 + \Delta t$, ... w odpowiedni sposób.

Z równania Schrödingera mamy mianowicie

$$\psi'_R = H\psi_I, \quad \psi'_I = -H\psi_R.$$

Po dyskretyzacji czasu (Δt) i przestrzeni (Δx) odkładamy na osi czasowej odcinki $\Delta t/2$. Ponieważ ewolucja ψ_R wyznaczana jest przez ψ_I , natomiast ewolucja ψ_I wyznaczana jest przez ψ_R to możemy zastosować następujący schemat iteracyjny. Dla części rzeczywistej zapiszemy

$$\psi_R(x, t + \Delta t) = \psi_R(x, t) + \Delta t H \psi_I(x, t + \Delta t/2) \quad (1)$$

a dla urojonej

$$\psi_I(x, t + (3/2)\Delta t) = \psi_I(x, t + \Delta t/2) - \Delta t H \psi_R(x, t + \Delta t). \quad (2)$$

Centralne różnice skończone wyznaczają pochodne z dokładnością do drugiego rzędu w t . Metoda jest stabilna o ile tylko $\Delta t < \Delta x^2$.

Problem polega tylko na tym, że nie znamy wartości ψ_R i ψ_I w tej samej chwili czasu t lecz naprzemiennie w co drugim kroku o długości $\Delta t/2$. Można je jednak wyznaczyć w tej samej chwili przez interpolację. Dotyczy to również warunku początkowego. Rzeczywista część funkcji falowej ψ_R jest zadana w chwili t , a część urojona ψ_I powinna być zadana w chwili $t + \Delta t/2$.

$$p(x, t; x_0, p_0, w_0) = \frac{2\sqrt{w_0}\pi^{1/4}}{\sqrt{1 - 2itw_0^2}} \exp\left(-\frac{p_0^2}{(2w_0)^2}\right) \times \exp\left(w_0^2 \frac{(i(x_0 - x) - p_0/(2w_0^2))^2}{(1 - 2itw_0^2)}\right) \quad (3)$$

Schemat programu wygląda jakoś tak.

```

/*
 * Scheme of the Wave Packet program
 * (basis: Horbatsch, Maple program)
 *
 */

static double dt,dth, Time, dxsq;
static int nx;
static double[] xmesh, psiR, psiI, Vpot, Hpsi;

// time discretization
// time step
dt = 1d/50d;

// half time step
dth = dt/2d;

// space discretization
// space step
dx = 1d/5d;
dxsq = 1d/(2*dx^2);

// space extension
xmax = 15d;

// number of space points
nx = (int)2*xmax/dx + 1;

// x mesh
for(int i=0;i<nx;i++)
    xmesh[i] = -xmax + (i-1)*dx;

// initialize real and imaginary parts of Psi
// at t = 0 and t = dt/2 respectively
w0 = 1d/2d;
x0 = -10d;
p0 = 2d;
for(int i;i<nx;i++) {
    psiR[i] = pack(xmesh[i], 0,x0,p0,w0).Re(); // at t= 0
    psiI[i] = pack(xmesh[i],dth,x0,p0,w0).Im(); // at t=dth
}

// picture psiR[i], psiI[i]
// and the density |psiR[i]+psiI[i]|^2
// ...

```

```

// Hamiltonian on the mesh
// Kinetic energy couples nearest neighbours
// Potential energy is local

// Potential; square well
for(int i=0;i<nx;i++)
    Vpot[i] = Math.abs(xmesh[i]) <= 2 ? -4 : 0;

// picture Vpot[i]

// Calculate H psiR(0), H psiI(dth)
doHpsi(psiR);
doHpsi(PsiI);

// doHpsi
public void doHpsi(double[] args) {
    // calculates H psiR or HpsiI
    for(int i=1;i<nx-1;i++)
        Hpsi[i] = -dxsq * (args[1][i+1]+args[1][i-1]-2*args[1][i])
            +Vpot[i]*args[1][i];
    Hpsi[0] = -dxisq*(args[1][2]-2*args[1][1])+Vpot[1]*args[1][1];
    Hpsi[nx] = -dxisq*(args[1][nx-1]-2*args[1][nx])
        +Vpot[nx]*args[1][nx];
}

/*
 * The basic time evolution step for the real and imaginary
 * parts of the wavefunction. It assumes that the imaginary
 * part is a half-step ahead of the real part.
 */
public void timeStep() {
    for(int i=0;i<nx-1;i++) {
        psiR[i] = psiR[i] + dt*Hpsi[i];
        psiI[i] = psiI[i] - dt*Hpsi[i];
    }
    // Time:=Time+dt;
}

/*
 * Set up the time-loop.
 */
while ( go ) {

```

```

    timeStep();
    // plot xmesh[i],psiR[i]^2+psiI[i]^2,psiR[i],psiI
}

// "go" is true if the process is running and false otherwise

class complex {
    double re, im;

    complex() {
        re = 0; im = 0;
    }
    complex(double x, double y){
        re = x;
        im = y;
    }
    public void add(complex a, complex b){
        re = a.re + b.re;
        im = a.im + b.im;
    }
    public void mult(complex a, complex b){
        re = a.re * b.re - a.im * b.im;
        im = a.re * b.im + a.im * b.re;
    }
    public void set(complex a){
        re = a.re;
        im = a.im;
    }
}
.

```

3 Metoda NCGF rozwiązywania równania Schrödingera

Metoda NCGF (Numerova-Cowella-Goodwina-Foxa) nadaje się do rozwiązywania specjalnych zagadnień własnych.

Z a d a n i e 1.

Napisz program NCGF w JavaTM. Zastosuj go do rozwiązania równań rozpatrywanych w zadaniach 1-4 zamieszczonych w części Metoda NCGF

Jeśli rozpatrujemy rozpad stanów rezonansowych, to przybliżone położenie energii stanów rezonansowych (przy założeniu, że $\Gamma \ll E$) można oszacować rozwiązując równanie Schrödingera metodą NCGF.