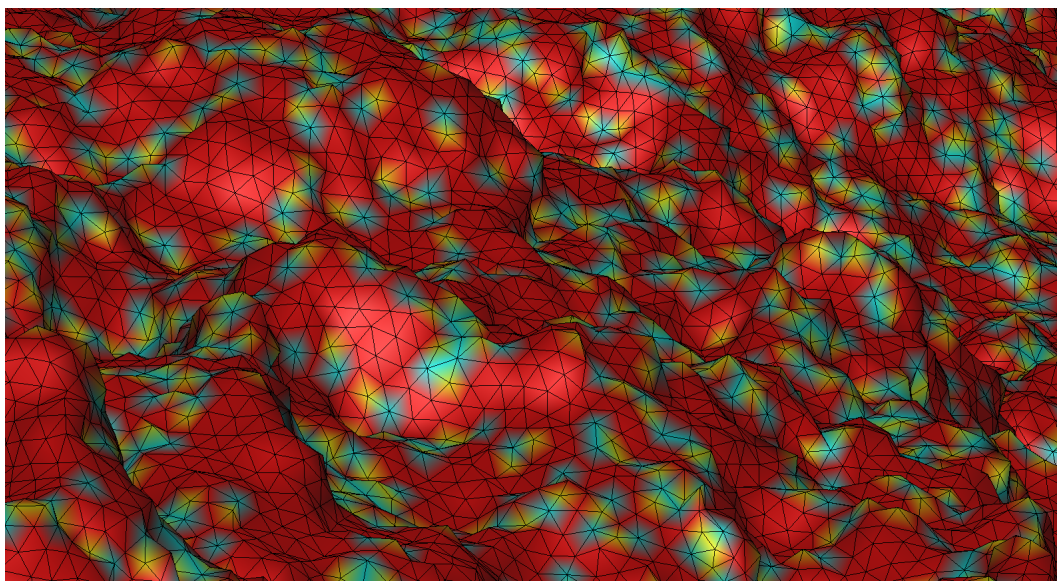


ΚΩΝΣΤΑΝΤΙΝΟΣ Ν. ΑΝΑΓΝΩΣΤΟΠΟΥΛΟΣ

Αναπληρωτής Καθηγητής
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Υπολογιστική Φυσική

Σημειώσεις



Το παρόν έργο αδειοδοτείται υπό τους όρους της άδειας Creative Commons Αναφορά Δημιουργού - Μη Εμπορική Χρήση - Παρόμοια Διανομή 3.0. Για να δείτε ένα αντίγραφο της άδειας αυτής επισκεφτείτε τον ιστότοπο

<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/3.0/gr/>

20 Απριλίου 2021

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1	Κβαντική Δυναμική	1
1.1	Εισαγωγή	2
1.2	Το Σχήμα του Visscher	5
1.3	Το Πρόγραμμα	9
1.4	Ελεύθερο Σωματίο	14
1.5	Σκέδαση	19
1.6	Ο Αρμονικός Ταλαντωτής	22
1.7	Μετρήσεις	24
1.8	Παράρτημα	32
1.8.1	Απόδειξη Σχέσης (1.40)	32
1.8.2	Απόδειξη Σχέσης (1.48)	33
1.8.3	Αναμενόμενες Τιμές	36
1.9	Ασκήσεις	44
	Bibliography	47

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

Κβαντική Δυναμική

Στα προηγούμενα κεφάλαια συζητήθηκε ο αριθμητικός υπολογισμός του ενεργειακού φάσματος και οι ιδιότητες των ιδιοκαταστάσεων της Χαμιλτονιανής ενός σωματιδίου που κινείται σε μία διάσταση. Οι καταστάσεις αυτές λέγονται *στάσιμες* γιατί, όταν το σωματίδιο βρεθεί σε μία από αυτές, η κατάστασή του δεν μεταβάλλεται με το χρόνο. Οποιαδήποτε άλλη κατάσταση μεταβάλλεται δυναμικά με το χρόνο, σύμφωνα με την εξίσωση του Schrödinger. Η εξίσωση αυτή είναι πρώτης τάξης ως προς το χρόνο και η γνώση της κατάστασης του σωματιδίου μια χρονική στιγμή προσδιορίζει ντετερμινιστικά την κατάσταση του σωματιδίου οποιαδήποτε άλλη χρονική στιγμή, υποθέτοντας ότι δεν γίνεται μέτρηση. Οι στάσιμες καταστάσεις αποτελούν μία βάση στο χώρο Hilbert των καταστάσεων του σωματιδίου και η χρονική εξέλιξη της κατάστασης του σωματιδίου μπορεί να εκφραστεί απλά ως γραμμικός συνδυασμός τους με τη χρονική εξέλιξη να βρίσκεται μόνο στη χρονική εξάρτηση των συντελεστών του γραμμικού συνδυασμού. Οι συντελεστές αυτοί μεταβάλλονται αρμονικά με το χρόνο με συχνότητες που είναι ανάλογες της ενέργειας της αντίστοιχης ενεργειακής ιδιοκατάστασης.

Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιαστούν απλές αριθμητικές μέθοδοι για την επίλυση της χρονοεξαρτώμενης εξίσωσης του Schrödinger. Η μέθοδος του Visscher δίνει έναν αλγόριθμο ενός βήματος στο χρόνο, αλλά απαιτεί πολύ μικρό χρονικό βήμα για να είναι ευσταθής. Η συνθήκη ευστάθειας είναι παρόμοια με τη συνθήκη Courant (8.28) που συναντήσαμε στη μελέτη της εξίσωσης διάχυσης. Στο επόμενο κεφάλαιο θα συζητηθεί το σχήμα Crank-Nicholson, το οποίο είναι ευσταθές χωρίς να χρειάζεται να ικανοποιείται μια τέτοια συνθήκη, αλλά το τίμημα είναι ότι σε κάθε βήμα χρειάζεται να αντιστρέφεται ένας τρι-διαγώνιος πίνακας. Η απλότητα του σχήματος Visscher μας επιτρέπει να μελετήσουμε εύκολα τη δυναμική συμπεριφορά ενός σωματιδίου περιορισμένου να κινείται στη μία διάσταση και να καταλάβουμε βαθύτερα την κβαντική δυναμική.

1.1 Εισαγωγή

Η εξίσωση Schrödinger που δίνει τη χρονική εξέλιξη της κυματοσυνάρτησης $\psi(x, t)$ είναι

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \psi(x, t). \quad (1.1)$$

\hat{H} είναι ο τελεστής της Χαμιλτονιανής σε αναπαράσταση θέσης και δίνεται από τη σχέση

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\hat{x}). \quad (1.2)$$

Η πυκνότητα πιθανότητας εύρεσης του σωματιδίου στη θέση x δίνεται από τη σχέση

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \psi(x, t)^* \psi(x, t), \quad (1.3)$$

και η δυναμική εξέλιξη της $\psi(x, t)$ σύμφωνα με την (1.1) εγγυάται ότι η συνολική πιθανότητα

$$P(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t)^* \psi(x, t) dx \quad (1.4)$$

παραμένει ανεξάρτητη του χρόνου, οπότε με κατάλληλη κανονικοποίηση της $\psi(x, t)$ μπορούμε να επιλέξουμε $P(t) = P(0) = 1$.

Από την (1.1), βλέπουμε ότι οι ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής

$$\hat{H} \psi_n(x, t) = E_n \psi_n(x, t), \quad (1.5)$$

ικανοποιούν την εξίσωση

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n(x, t)}{\partial t} = E_n \psi_n(x, t), \quad (1.6)$$

οπότε η δυναμική τους εξέλιξη με το χρόνο δίνεται από τη σχέση

$$\psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}. \quad (1.7)$$

Στις καταστάσεις αυτές, οι αναμενόμενες τιμές μιας οποιασδήποτε φυσικής ποσότητας που αναπαρίσταται από τον τελεστή \hat{A} είναι ανεξάρτητες του χρόνου:

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle_n &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x, t)^* \mathcal{A}(\hat{x}, \hat{p}) \psi_n(x, t) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x)^* \mathcal{A}(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \psi_n(x) dx, \end{aligned} \quad (1.8)$$

αφού $(e^{-iE_n t/\hbar})^* e^{-iE_n t/\hbar} = 1$.

Οι ιδιοκαταστάσεις $\psi_n(x)$ είναι μια βάση στον χώρο Hilbert των καταστάσεων που μπορεί να βρεθεί το σωματίδιο. Οπότε, αν τη χρονική στιγμή $t = 0$ το σωματίδιο βρίσκεται στην κατάσταση $\psi(x, 0)$, αυτή μπορεί να γραφτεί σαν γραμμικός συνδυασμός

$$\psi(x, 0) = \sum_n c_n \psi_n(x). \quad (1.9)$$

Τότε η κατάσταση

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}, \quad (1.10)$$

ικανοποιεί την εξίσωση (1.1) με την αρχική συνθήκη (1.9), οπότε είναι η ζητούμενη λύση που δίνει τη δυναμική εξέλιξη της κατάστασης του σωματιδίου.

Η χρονική εξέλιξη της αναμενόμενης τιμής $\langle \hat{A} \rangle(t)$ στην κατάσταση $\psi(x, t)$ δίνεται από τη σχέση

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t)^* \mathcal{A}(\hat{x}, \hat{p}) \psi(x, t) dx. \quad (1.11)$$

Αντικαθιστώντας την (1.10) στην (1.11) παίρνουμε

$$\langle \hat{A} \rangle(t) = \sum_{n,m} c_n^* c_m \hat{A}_{nm} e^{i(E_n - E_m)t/\hbar}, \quad (1.12)$$

όπου

$$\hat{A}_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x)^* \mathcal{A}(\hat{x}, \hat{p}) \psi_m(x) dx. \quad (1.13)$$

Για να λύσουμε αριθμητικά την εξίσωση (1.1), είναι θεμιτό να την μετασχηματίσουμε σε αδιάστατη μορφή. Για τον λόγο αυτό, επιλέγουμε μια κλίμακα μήκους L και εκφράζουμε όλες τις φυσικές ποσότητες σε μονάδες που προκύπτουν από αυτή. Επιλέγουμε

$$p_0 = \frac{\hbar}{L}, \quad E_0 = \frac{p_0^2}{m} = \frac{\hbar^2}{mL^2}, \quad t_0 = \frac{\hbar}{E_0} = \frac{mL^2}{\hbar}, \quad (1.14)$$

ώς μονάδες ορμής, ενέργειας και χρόνου. Επίσης, είναι βολικό να θεωρήσουμε τις μονάδες κυματαριθμού και ταχύτητας:

$$k_0 = \frac{p_0}{\hbar} = \frac{1}{L}, \quad v_0 = \frac{p_0}{m} = \frac{\hbar}{mL}. \quad (1.15)$$

Μετρώντας τις φυσικές ποσότητες ως πολλαπλάσια των παραπάνω μονάδων, μπορούμε να ορίσουμε τις αδιάστατες ποσότητες:

$$\tilde{x} = \frac{x}{L}, \quad \tilde{p} = \frac{p}{p_0}, \quad \tilde{E} = \frac{E}{E_0}, \quad \tilde{t} = \frac{t}{t_0}, \quad \tilde{v} = \frac{v}{v_0}. \quad (1.16)$$

Η δυναμική ενέργεια $V(x)$ μετριέται σε μονάδες ενέργειας E_0 , οπότε ορίζουμε την αδιάστατη συνάρτηση του δυναμικού

$$\tilde{V}(\tilde{x}) = \frac{V(\tilde{x}L)}{E_0} \quad (1.17)$$

καθώς και την κυματοσυνάρτηση

$$\tilde{\psi}(\tilde{x}, \tilde{t}) = \sqrt{L} \psi(\tilde{x}L, \tilde{t}t_0). \quad (1.18)$$

Οι κυματοσυναρτήσεις είναι κανονικοποιημένες στη μονάδα:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, t)^* \psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(\tilde{x}, \tilde{t})^* \tilde{\psi}(\tilde{x}, \tilde{t}) d\tilde{x} = 1. \quad (1.19)$$

Αντικαθιστώντας τις (1.16), (1.17) και (1.18) στην (1.1), παίρνουμε:

$$i \frac{\partial \tilde{\psi}(\tilde{x}, \tilde{t})}{\partial \tilde{t}} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \tilde{\psi}(\tilde{x}, \tilde{t})}{\partial \tilde{x}^2} + \tilde{V}(\tilde{x}) \tilde{\psi}(\tilde{x}, \tilde{t}). \quad (1.20)$$

Ας θεωρήσουμε το παράδειγμα του απλού αρμονικού ταλαντωτή:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \quad (1.21)$$

Τότε, παίρνοντας ως $L = \sqrt{\hbar/m\omega}$, οι μονάδες μέτρησης είναι

$$L = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}, \quad p_0 = \sqrt{\hbar m \omega}, \quad E_0 = \hbar \omega, \quad t_0 = \frac{1}{\omega}, \quad v_0 = p_0, \quad (1.22)$$

και το αδιάστατο δυναμικό

$$\tilde{V}(\tilde{x}) = \frac{1}{2} \tilde{x}^2. \quad (1.23)$$

Στις επόμενες παραγράφους θα χρησιμοποιούμε μόνο αδιάστατες ποσότητες και θα παραλείπουμε τις περισπωμένες. Η εξίσωση (1.20) θα γράφεται για συντομία:

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t). \quad (1.24)$$

Στα προβλήματα που θα λύσουμε, θα χρησιμοποιήσουμε ως αρχική κατάσταση του σωματιδίου το κυματοπακέτο

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{ik_0(x-x_0)} e^{-\frac{1}{4} \frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}}. \quad (1.25)$$

Στην κατάσταση αυτή, οι δυνατές θέσεις παρατήρησης του σωματιδίου κατανέμονται σύμφωνα με την πυκνότητα πιθανότητας

$$\rho(x, 0) = \psi(x, 0)^* \psi(x, 0) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{(x-x_0)^2}{\sigma^2}}, \quad (1.26)$$

η οποία είναι Gaussian με κέντρο στο x_0 και εύρος σ . Οι αναμενόμενες τιμές

$$\langle x \rangle = x_0, \quad \langle p \rangle = k_0, \quad (1.27)$$

δείχνουν πως πρόκειται για σωματίδιο εντοπισμένο κοντά στη θέση x_0 με μέση ορμή k_0 . Επίσης, είναι χρήσιμες και οι σχέσεις:

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= x_0^2 + \sigma^2, & \langle p^2 \rangle &= k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2}, \\ \Delta x^2 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \sigma^2, & \Delta p^2 &= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \frac{1}{4\sigma^2}, \end{aligned} \quad (1.28)$$

από όπου φαίνεται ότι η παράμετρος σ είναι ένα μέτρο της διασποράς των μετρήσεων της θέσης και της ορμής του σωματιδίου στην κατάσταση αυτή. Μικρό σ σημαίνει μικρή διασπορά στη θέση και μεγάλη στην ορμή, και αντίστροφα.

1.2 Το Σχήμα του Visscher

Στην ενότητα αυτή παρουσιάζεται μια αριθμητική μέθοδος επίλυσης της (1.1) χρησιμοποιώντας ένα σχήμα που δίνει την δυναμική εξέλιξη που προκύπτει από την (1.1) με έναν αλγόριθμο ενός χρονικού βήματος (explicit method ή leapfrog method). Ένας τέτοιος αλγόριθμος χρησιμοποιήθηκε στο Κεφάλαιο 8, ο οποίος συνοψίζεται από την εξίσωση (8.26). Η μέθοδος αυτή δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη λύση της (1.1) γιατί είναι ασταθής και η πιθανότητα (1.4) δεν διατηρείται. Ο Visscher [1] πρότεινε μία βελτίωση της (8.26), όπου χρησιμοποιεί το πραγματικό και το φανταστικό μέρος της κυματοσυνάρτησης $\psi(x, t)$ σε διαφορετικούς χρόνους. Αυτό έχει σαν αποτέλεσμα την ευστάθεια της δυναμικής εξέλιξης και την διατήρηση της πιθανότητας (1.4).

Αναζητούμε αριθμητικές λύσεις της εξίσωσης (1.20)

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t), \quad (1.29)$$

στο διάστημα $x \in [-x_{\max}, x_{\max}]$ και $t \in [0, t_{\max}]$. Ορίζουμε το δισδιάστατο πλέγμα, όπου σε μια συγκεκριμένη (διακριτή) χρονική στιγμή έχουμε N_x διακριτά σημεία

$$x_i = -x_{\max} + (i-1)\Delta x, \quad i = 1, \dots, N_x, \quad \Delta x = \frac{2x_{\max}}{N_x - 1}, \quad (1.30)$$

ενώ ο χρόνος παίρνει τις $2N_t$ διακριτές τιμές

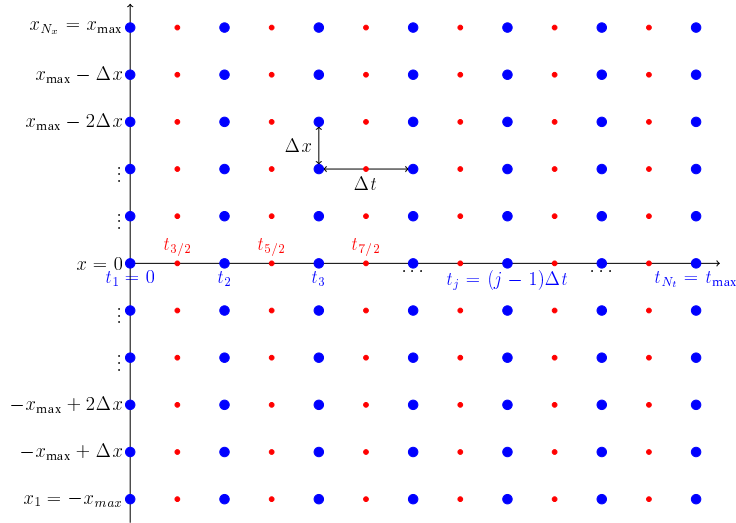
$$\begin{aligned} t_n &= (n-1)\Delta t, & n &= 1, \dots, N_t, & \Delta t &= \frac{t_{\max}}{N_t-1}, \\ t_{n+\frac{1}{2}} &= t_n + \frac{\Delta t}{2}, & n &= 1, \dots, N_t. \end{aligned} \quad (1.31)$$

Η κυματοσυνάρτηση $\psi(x, t)$ χωρίζεται στο πραγματικό και το φανταστικό της μέρος

$$\psi(x, t) = R(x, t) + iI(x, t), \quad (1.32)$$

όπου οι $R(x, t) \equiv \text{Re}(\psi(x, t))$ και $I(x, t) \equiv \text{Im}(\psi(x, t))$ είναι πραγματικές συναρτήσεις. Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (1.85) παίρνουμε

$$\begin{aligned} \frac{\partial R(x, t)}{\partial t} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 I(x, t)}{\partial x^2} + V(x)I(x, t) \\ \frac{\partial I(x, t)}{\partial t} &= +\frac{1}{2} \frac{\partial^2 R(x, t)}{\partial x^2} - V(x)R(x, t) \end{aligned} \quad (1.33)$$



Σχήμα 1.1: Το χωροχρονικό πλέγμα στο σχήμα του Visscher αποτελείται από γεγονότα (x_i, t_n) (μπλέ κύκλοι) και $(x_i, t_{n+\frac{1}{2}})$ (κόκκινοι κύκλοι), $x_i = -x_{\max} + (i-1)\Delta x$, $i = 1, \dots, N_x$, $t_n = (n-1)\Delta t$, $n = 1, \dots, N_t$, $t_{n+\frac{1}{2}} = t_n + \Delta t/2$. Στους μπλε κύκλους ορίζεται το πραγματικό μέρος της κυματοσυνάρτησης $R_i^n = R(x_i, t_n)$, ενώ στους κόκκινους το φανταστικό $I_i^n = I(x_i, t_{n+\frac{1}{2}})$, έτσι ώστε $\psi_i^n = \psi(x_i, t_n) \equiv R_i^n + iI_i^n$.

Η ιδέα του Visscher ήταν να θεωρήσει ένα σχήμα που να υπολογίζει τις $R(x, t)$ και $I(x, t)$ σε διαφορετικές διαδοχικές χρονικές στιγμές t_n και $t_{n+\frac{1}{2}}$. Το

τμήμα του χωρόχρονου (x, t) με $x \in [-x_{\max}, x_{\max}]$ και $t \in [0, t_{\max}]$, προσεγγίζεται από $N_x \times N_t$ διακριτά χωροχρονικά σημεία (x_i, t_n) και $(x_i, t_{n+\frac{1}{2}})$, όπως στο Σχήμα 1.1, έτσι ώστε

$$\begin{aligned} x_i &= -x_{\max} + (i-1)\Delta x \quad i = 1, \dots, N_x, & \Delta x &= \frac{2x_{\max}}{N_x - 1}, \\ t_n &= (n-1)\Delta t \quad n = 1, \dots, N_t, & \Delta t &= \frac{t_{\max}}{N_t - 1}. \end{aligned} \quad (1.34)$$

Στο όριο όπου $\Delta x \rightarrow 0$ και $\Delta t \rightarrow 0$, η $R(x, t)$ θα προσεγγίζεται από τις διακριτές τιμές $\{R(x_i, t_n)\}$, ενώ η $I(x, t)$ από τις $\{I(x_i, t_{n+\frac{1}{2}})\}$. Τότε η κυματοσυνάρτηση $\psi(x, t)$ μπορεί να προσεγγιστεί από τις διακριτές τιμές¹

$$\psi(x_i, t_n) \equiv R(x_i, t_n) + i I(x_i, t_{n+\frac{1}{2}}). \quad (1.35)$$

Θα χρησιμοποιήσουμε τον συμβολισμό

$$\psi_i^n = \psi(x_i, t_n), \quad R_i^n = R(x_i, t_n), \quad I_i^n = I(x_i, t_{n+\frac{1}{2}}), \quad (1.36)$$

σύμφωνα με τον οποίο έχουμε

$$\psi_i^n = R_i^n + i I_i^n. \quad (1.37)$$

Στο κεφάλαιο αυτό θα χρησιμοποιήσουμε τις συνοριακές συνθήκες

$$\psi(-x_{\max}, t) = \psi(x_{\max}, t) = 0, \quad (1.38)$$

οι οποίες, επί της ουσίας, βάζουν το σωματίδιο σε ένα απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού

$$V(-x_{\max}) = V(x_{\max}) = +\infty. \quad (1.39)$$

Τότε, το σχήμα Visscher δίνεται από τις επαγωγικές σχέσεις ενός χρονικού βήματος

$$\begin{aligned} R_i^{n+1} &= R_i^n - a(I_{i+1}^n - 2I_i^n + I_{i-1}^n) + \Delta t V_i I_i^n \\ I_i^{n+1} &= I_i^n + a(R_{i+1}^{n+1} - 2R_i^{n+1} + R_{i-1}^{n+1}) - \Delta t V_i R_i^{n+1}, \end{aligned} \quad (1.40)$$

όπου

$$a = \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} \quad (1.41)$$

είναι η παράμετρος του Courant.

¹Για έναν πιο ακριβή ορισμό, δείτε την Άσκηση 3

Οι παραπάνω εξισώσεις λύνονται λαμβάνοντας υπόψη τις αρχικές συνθήκες και τις συνοριακές συνθήκες. Οι συνοριακές συνθήκες (1.38) υλοποιούνται από τις σχέσεις

$$R_1^n = R_{N_x}^n = I_1^n = I_{N_x}^n = 0. \quad (1.42)$$

Οι αρχικές συνθήκες καθορίζονται από την επιλεγμένη αρχική κυματοσυνάρτηση $\psi(x, 0)$. Λόγω της (1.35), η αρχική τιμή

$$\psi_i^1 = R_i^1 + i I_i^1, \quad (1.43)$$

πρέπει να οριστεί με προσοχή. Σύμφωνα με τον ορισμό (1.36) $I_i^1 = I(x_i, \Delta t/2)$, η οποία πρέπει να υπολογιστεί από την $I(x_i, 0) \equiv \text{Im}(\psi(x_i, 0))$. Κατ' εξαίρεση, θα χρησιμοποιήσουμε μία φορά την (1.40) για να προωθήσουμε την $I(x_i, 0)$ κατά $\Delta t/2$, ορίζοντας:

$$I_i^1 = \text{Im}(\psi(x_i, 0)) + \frac{a}{2} (R_{i+1}^1 - 2R_i^1 + R_{i-1}^1) - \frac{\Delta t}{2} V_i R_i^1, \quad (1.44)$$

όπου $R_i^1 = \text{Re}(\psi(x_i, 0))$.

Η απόδειξη της εξίσωσης (1.40) μπορεί να βρεθεί στο Παράρτημα 1.8.1. Στην εργασία [1] δείχνεται ότι η δυναμική εξέλιξη που δίνεται από τις εξισώσεις (1.40) είναι ευσταθής αν

$$-\frac{2}{\Delta t} \leq V_i \leq \frac{2}{\Delta t} - \frac{2}{\Delta x^2} \quad (1.45)$$

για όλα τα x_i . Αυτό σημαίνει πως αν επιλέξουμε το Δx , το βήμα Δt θα πρέπει να ικανοποιεί ταυτόχρονα τις παρακάτω ανισότητες:

$$\Delta t \leq \frac{2}{V_+ + \frac{2}{\Delta x^2}}, \quad \Delta t \leq \frac{2}{V_-}, \quad (1.46)$$

όπου $V_+ = \max\{0, \max_i\{V_i\}\}$, $V_- = \min\{0, \min_i\{V_i\}\}$. Για $V_+ = 0$, η αριστερή ανισότητα δίνει τη συνθήκη $a \leq 1/2$. Για $V_- = 0$, η δεξιά ανισότητα δεν περιορίζει το Δt .

Όπως αναφέρθηκε και στην αρχή της παραγράφου, η πρόκληση για μια αριθμητική μέθοδο που χρησιμοποιείται για την επίλυση της εξίσωσης Schrödinger είναι να διατηρεί την ολική πιθανότητα (1.4) σταθερή στο χρόνο. Η πυκνότητα πιθανότητας (1.3)

$$\rho(x, t) = \psi(x, t)^* \psi(x, t) = R(x, t)^2 + I(x, t)^2, \quad (1.47)$$

δεν μπορεί να οριστεί ακριβώς στο σχήμα του Visscher, αφού οι συναρτήσεις $R(x, t)$ και $I(x, t)$ ορίζονται στο πλέγμα σε διαφορετικές χρονικές στιγμές. Οι ποσότητες

$$\begin{aligned} P^n &\equiv \sum_i \rho_i^n, & \rho_i^n &= (R_i^n)^2 + I_i^n I_i^{n-1} \\ P^{n+\frac{1}{2}} &\equiv \sum_i \rho_i^{n+\frac{1}{2}}, & \rho_i^{n+\frac{1}{2}} &= (I_i^n)^2 + R_i^n R_i^{n+1} \end{aligned} \quad (1.48)$$

συγκλίνουν στις $P(t)$ και $\rho(t)$ στο όριο $\Delta t \rightarrow 0$ και διατηρούνται ακριβώς² από τις εξισώσεις εξέλιξης (1.40) και τις συνοριακές συνθήκες (1.42). Το σφάλμα στον υπολογισμό της $P(t)$ στο όριο $\Delta t \rightarrow 0$, μετά από παρέλευση χρόνου t_{\max} είναι $\mathcal{O}(\Delta t)$.

1.3 Το Πρόγραμμα

Προκειμένου να προγραμματίσουμε τις επαγωγικές σχέσεις (1.40), αποθηκεύουμε στη μνήμη τις τιμές R_i^n, R_i^{n+1} και I_i^n, I_i^{n+1} του πραγματικού και φανταστικού μέρους της κυματοσυνάρτησης τις χρονικές στιγμές t_n, t_{n+1} και $t_{n+\frac{1}{2}}, t_{n+1+\frac{1}{2}}$ αντίστοιχα. Για το λόγο αυτό ορίζουμε τα arrays

```
real (8), dimension(2,P) :: repsi, impsi
```

στα οποία $R_i^n \rightarrow \text{repsi}(1, i), R_i^{n+1} \rightarrow \text{repsi}(2, i), I_i^n \rightarrow \text{impsi}(1, i), I_i^{n+1} \rightarrow \text{impsi}(2, i)$. Για ευκολία, ορίζουμε τις παραμέτρους

```
integer , parameter :: old=1, new=2
```

έτσι ώστε, λ.χ., $R_i^n \rightarrow \text{repsi}(\text{old}, i), R_i^{n+1} \rightarrow \text{repsi}(\text{new}, i)$.

Ο χρήστης δίνει στην είσοδο τις τιμές $\Delta x \rightarrow dx, a = \Delta t/2(\Delta x)^2 \rightarrow a, x_{\max} \rightarrow x_{\max}, t_{\max} \rightarrow t_{\max}$. Η τιμή του $N_x = [2x_{\max}/\Delta x] + 1$, και θα πρέπει να είναι μικρότερη από την επιλεγμένη τιμή της παραμέτρου P που καθορίζει τα μεγέθη των arrays repsi και impsi. Αφού υπολογιστεί, η τιμή του Δx επανακαθορίζεται, έτσι ώστε το $2x_{\max}$ να είναι ακέραιο πολλαπλάσιό του. Η παράμετρος $\Delta t \rightarrow dt$ υπολογίζεται από τα $\Delta x, a$, και στη συνέχεια δίνει τον αριθμό των χρονικών βημάτων³ $N_t = [t_{\max}/\Delta t] + 1$.

Η αρχική κυματοσυνάρτηση δίνεται από το κυματοπακέτο (1.25), και ο χρήστης δίνει στην είσοδο τις τιμές των παραμέτρων $x_0 \rightarrow x_0, \sigma \rightarrow \text{sigma}$ και $k_0 \rightarrow k_0$, που είναι το κέντρο, η διασπορά και η μέση ορμή του κυματοπακέτου αντίστοιχα.

Οι τιμές του δυναμικού $V_i \rightarrow V(i)$ υπολογίζονται στο κυρίως πρόγραμμα

```
real(8), dimension(P) :: V

do ix = 1, Nx
  x = -xmax + (ix-1)*dx
```

²Η απόδειξη δίνεται στο Παράρτημα 1.8.2.

³Επειδή το t_{\max} μπορεί να μην είναι ακέραιο πολλαπλάσιο του Δt , αφού υπολογιστεί το N_t , τα Δt και a ξαναυπολογίζονται από τις σχέσεις $\Delta t = t_{\max}/(N_t - 1), a = \Delta t/2(\Delta x)^2$.

```
V(ix) = 0.5 D0 * x * x
end do
```

και κάθε δυναμικό πεδίο που μας ενδιαφέρει να μελετήσουμε θα πρέπει να προγραμματιστεί ξεχωριστά.

Η δομή του προγράμματος είναι:

1. Είσοδος δεδομένων
2. Υπολογισμός δυναμικού
3. Υπολογισμός σταθερών παραμέτρων
4. Υπολογισμός αρχικής κυματοσυνάρτησης (1.25)
5. Υπολογισμός της I_i^1 από την (1.44) (μισό βήμα $\Delta t/2$)
6. Επαναληπτική εφαρμογή των σχέσεων (1.40) (από ένα βήμα Δt)
7. Αποθήκευση των δεδομένων $(n, t_n, x_i, \rho_i^n, R_i^n, I_i^n)$ στο αρχείο psi.

Για εξοικονόμηση χώρου και ευκολότερη ανάλυση, η αποθήκευση γίνεται όταν το n είναι πολλαπλάσιο μιας παραμέτρου tskip. Η παράμετρος tskip δίνεται από τον χρήστη όταν ξεκινάει η εκτέλεση του προγράμματος.

Η τιμή της παραμέτρου του Courant $a = \Delta t/2(\Delta x)^2$ καθορίζεται ελεύθερα από τον χρήστη, αλλά η subroutine compute_amax() υπολογίζει τη μέγιστη τιμή a_{\max} που δίνει ευσταθείς λύσεις του σχήματος Visscher σύμφωνα με τις (1.45). Το πρόγραμμα ελέγχει αν ισχύει $a \leq a_{\max}$, και αν όχι, τυπώνει προειδοποιητικό μήνυμα στο stdout.

Το πλήρες πρόγραμμα για ένα σωματίο στο δυναμικό του αρμονικού ταλαντωτή (1.23) δίνεται παρακάτω. Μπορεί να βρεθεί στο αρχείο tdse_fd.f90 του συνοδευτικού λογισμικού.

```
!=====
! Time Dependent Schrodinger Equation
!
! Implements Visscher's explicit scheme
!
! file : tdse_fd.f90
!-----
program      tdse_fd
implicit none
integer      , parameter      :: P = 100000
real        (8) , dimension(2,P) :: repsi , impsi
real        (8) , dimension( P) :: V      , rho
```

```

integer      , parameter      :: old=1, new=2
integer      :: tskip
real      (8)      :: k0,sigma,sigma2
real      (8)      :: xmax , tmax, x, t, dt, dx, a
real      (8)      :: amax, x0,norm, pexp, delpsi
integer      :: Nx      , Nt
integer      :: ix      , it
real      (8), parameter      :: tinypsi = 1.0D-20
real      (8), parameter      :: PI=atan2(1.0D0,0.0D0)*2.0D0
integer , parameter      :: f_psi=11,f_rho=12
!
print *, '# Enter x0, sigma, k0, dx, a, xmax, tmax, tskip: '
read  *,          x0, sigma, k0, dx, a, xmax, tmax, tskip
!
Nx      = INT(2.0D0*xmax/dx) + 1;
dx      =      2.0D0*xmax/(Nx - 1)
!
! Potential:
V      = 0.0D0
do ix = 1, Nx
  x      = -xmax + (ix-1)*dx
  V(ix) = 0.5D0 * x * x
end do
call compute_amax(V,Nx,dx,amax)      ! Visscher's conditions
!
dt      = 2.0D0 * a * dx * dx
Nt      = INT( tmax/dt) + 1
dt      =      tmax/(Nt-1)
a      = 0.5D0 * dt/(dx*dx)
sigma2 = sigma*sigma
!
print *, '# -----'
print *, '#      x0, sigma, k0:'
print *, '# ', x0, sigma, k0
print *, '#      xmax, tmax, tskip:'
print *, '# ', xmax, tmax, tskip
print *, '#      Nx, Nt, dx, dt:'
print *, '# ', Nx, Nt, dx, dt
print *, '#      a, amax:'
print *, '# ', a, amax
if( a>amax ) print *, '# WARNING: a>amax'
print *, '# -----'
if( Nx      > P ) stop 'Nx > P'
if( Nx      < 3 ) stop 'Nx too small'
if( Nt/tskip < 2 ) stop 'Nt too small'
open(unit=f_rho, file='rho')
open(unit=f_psi, file='psi')
!
! Initial condition:

```

```

t = 0.0D0;
rho          = 0.0D0
repsi( : ,1 ) = 0.0D0; impsi( : ,1 ) = 0.0D0
repsi( : ,Nx) = 0.0D0; impsi( : ,Nx) = 0.0D0
norm  = (2.0D0*PI*sigma2)**(-0.25D0)
do ix = 2, Nx-1
  x = -xmax + (ix-1)*dx
  pexp = 0.25D0 * (x-x0) * (x-x0) / sigma2
  if( pexp < -log(tinypsi)) then !avoid very small numbers
    repsi(old,ix) = norm*exp( -pexp ) * cos( k0 * (x-x0) )
    impsi(old,ix) = norm*exp( -pexp ) * sin( k0 * (x-x0) )
  else
    repsi(old,ix) = 0.0d0
    impsi(old,ix) = 0.0d0
  end if
  rho(ix)          = repsi(old,ix)*repsi(old,ix)          &
                    + impsi(old,ix)*impsi(old,ix)
end do
norm = SUM(rho)*dx ! ~ ∫ rho(x) dx
!-----
!Output initial state:
it =0; t= 0.0D0
do ix = 1, Nx
  x = -xmax + (ix-1)*dx
  write(f_psi,101) it, t, x, rho(ix),&
                    repsi(old,ix), impsi(old,ix)
end do
write (f_psi,*) ' ';
!-----
!Time evolution:
!First evolve impsi by half time step:
do ix = 2, Nx-1
  delpsi          = a*(repsi(old,ix+1) -2.0D0*repsi(old,ix) &
                    + repsi(old,ix-1))-V(ix)*dt*repsi(old,ix)
  delpsi          = 0.5D0*delpsi
  if(abs(delpsi)>tinypsi)impsi(old,ix)=impsi(old,ix) + delpsi
end do
!-----
!Begin loop on time evolution:
do it = 1, Nt-1
  t = it*dt
  !update repsi:
  do ix = 2, Nx-1
    delpsi          = -a*(impsi(old,ix+1) -2.0D0*impsi(old,ix) &
                        + impsi(old,ix-1))+V(ix)*dt*impsi(old,ix)
    if(abs(delpsi)>tinypsi)repsi(new,ix)=repsi(old,ix)+delpsi
    rho(ix)          = repsi(old,ix)*repsi(new,ix)          &
                    + impsi(old,ix)*impsi(old,ix)
  end do

```



```

do ix = 2, Nx-1
  delpsi      = a*(repsi(new,ix+1) -2.0D0*repsi(new,ix) &
                + repsi(new,ix-1))-V(ix)*dt*repsi(new,ix)
  if(abs(delpsi)>tinypsi) impsi(new,ix)=impsi(old,ix)+delpsi
end do
!-----
!print norm2 of psi: ∫ rho(x) dx
norm  = SUM(rho)*dx
write(f_rho,*) it, t, norm
!print psi:
if(MOD(it,tskip) == 0)then
  do ix = 1, Nx
    x      = -xmax + (ix-1)*dx
    write(f_psi,101)it,t,x,rho(ix),repsi(new,ix),impsi(new,ix)
  end do
  write(f_psi,*) ' '
end if
!-----
!interchange new<-->old values:
repsi(old,:) = repsi(new,:)
impsi(old,:) = impsi(new,:)
end do ! do it = 1, Nt      end time evolution
!-----
close(f_rho)
close(f_psi)
101 FORMAT(I20,1000E30.15)
end program tdse_fd
!=====
!
subroutine      compute_amax(V,Nx,dx,a)
implicit none
integer                :: Nx
real(8),dimension(Nx) :: V
real(8)                :: dx,a
real(8)                :: V1, V2, dt1, dt2,dt

V1 = MAXVAL(V(1:Nx)); if( V1 <= 0.0D0) V1 = 0.0D0
V2 = -MINVAL(V(1:Nx)); if( V2 <= 0.0D0) V2 = 0.0D0

dt1 = 2.0D0/(V1 + (2.0D0/(dx*dx)) )
dt2 = HUGE(dt)
if(V2>0.0D0) dt2 = 2.0D0/V2

dt = dt2
if(dt1<dt2) dt = dt1

a = 0.5D0 * dt/(dx*dx)

```

```
end subroutine compute_amax
```

1.4 Ελεύθερο Σωματίο

Στην παράγραφο αυτή θα μελετήσουμε το σωματίο στο δυναμικό

$$V(x) = 0. \quad (1.49)$$

Στην πραγματικότητα, λόγω των συνοριακών συνθηκών (1.38), το σωματίο βρίσκεται σε ένα απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού (1.39) πλάτους $2x_{\max}$, αλλά όσο το σωματίο είναι βρίσκεται μακριά από τα τοιχώματα (δηλ. η τιμή της $\psi(x, t)$ είναι αμελητέα στη γειτονιά των σημείων $x = \pm x_{\max}$), η δυναμική του σωματιδίου θα προσεγγίζει πολύ καλά την δυναμική του ελεύθερου σωματιδίου.

Αφού θέσουμε $V(ix) = 0.0D0$ στο πρόγραμμα που βρίσκεται στο αρχείο `tdse_fd.f90`, μεταγλωττίζουμε και εκτελούμε το πρόγραμμα με τις εντολές:

```
> gfortran tdse_fd.f90 -o t
> echo -7 0.5 3.0 0.02 0.45 10 2.5 200 |./t
# Enter x0, sigma, k0, dx, a, xmax, tmax, tskip:
# -----
# x0, sigma, k0:
# -7.0 0.5 3.0
# xmax, tmax, tskip:
# 10.0 2.50 200
# Nx, Nt, dx, dt:
# 1001 6945 2.0E-002 3.60023E-004
# a, amax:
# 0.450029 0.50
# -----
```

Στο αρχείο `t.ho` βρίσκουμε σε τρεις στήλες τις τιμές (n, t_n, P^n) . Παρατηρήστε ότι οι τιμές P^n παραμένουν σταθερές⁴.

Στο αρχείο `psi` βρίσκουμε σε 6 στήλες τις τιμές $(n, t_n, x_i, \rho_i^n, R_i^n, I_i^n)$. Κάθε φορά που αλλάζει η τιμή του n έχουμε τυπώσει μια κενή γραμμή. Έτσι, μπορούμε με την `awk` να βρούμε πόσα στιγμιότυπα της κυματοσυνάρτησης έχουμε συλλέξει:

```
> awk 'NF<1{n++}END{print "Number of frames= ",n}' psi
Number of frames= 35
```

⁴Για άλλες επιλογές παραμέτρων, λ.χ. μεγαλύτερο `tmax`, μπορεί, λόγω αριθμητικών σφαλμάτων, να υπάρχει μια μικρή μεταβολή στα τελευταία σημαντικά ψηφία του P^n

Θυμηθείτε πως η εσωτερική μεταβλητή NF της `awk` μετράει τον αριθμό των λέξεων ($NF = \text{number of fields}$) που έχει κάθε γραμμή του αρχείου που διαβάζει. Στην περίπτωση του αρχείου `psi`, οι γραμμές που περιέχουν δεδομένα έχουν έξι “λέξεις” ($NF=6$), ενώ σε κάθε αλλαγή στιγμιότυπου αφήνουμε μια κενή γραμμή με μηδέν “λέξεις” ($NF=0$).

Φυσικά, ο λόγος που ο αριθμός των στιγμιότυπων είναι μικρότερος του $N_t = 6945$, είναι ότι τα τυπώνουμε κάθε φορά που το n είναι πολλαπλάσιο της παραμέτρου `tskip`, την οποία στο παραπάνω παράδειγμα έχουμε θέσει να είναι 200, οπότε τυπώνονται για $n_{\text{frame}} = 0, 1, \dots, [N_t/t_{\text{max}}] = 0, 1, \dots, 34$.

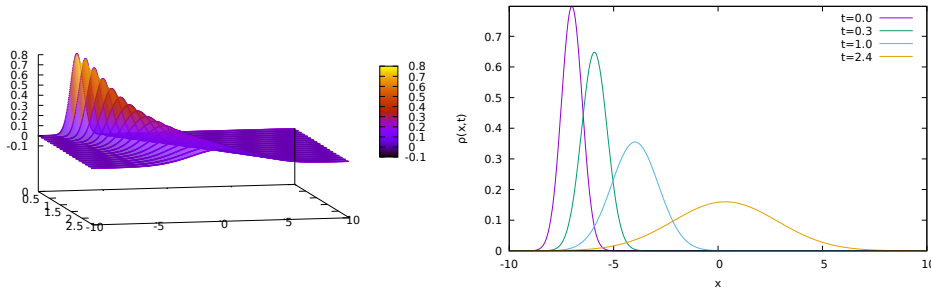
Με τον παραπάνω τρόπο μπορούμε να εκτυπώσουμε το στιγμιότυπο της κυματοσυνάρτησης που βρίσκεται στο αρχείο `psi` για t_n αμέσως μετά από μια επιλεγμένη τιμή του χρόνου t :

```
> awk -v t=2 '$2>t{p=1; print}p==1&&NF<1{exit}' psi > psi_t2.0
```

Με την εντολή αυτή, στο αρχείο `psi_t2.0` θα βρούμε το στιγμιότυπο ψ_i^n για $t_n \approx 2.016$, το οποίο είναι το αμέσως επόμενο στιγμιότυπο του $t = 2$.

Για να δούμε γραφικά τη χρονική εξέλιξη της $\rho(x, t)$ μπορούμε να κάνουμε την τρισδιάστατη γραφική παράσταση:

```
gnuplot> splot "psi" using 2:3:4 with dots
```



Σχήμα 1.2: Η πυκνότητα πιθανότητας $\rho(x, t)$ για το ελεύθερο σωματίο, όπως υπολογίστηκε από το πρόγραμμα `tdse_fd.f90` στη σελίδα 14.

Το αποτέλεσμα θα είναι⁵ το αριστερό σχήμα του Σχήματος 1.2

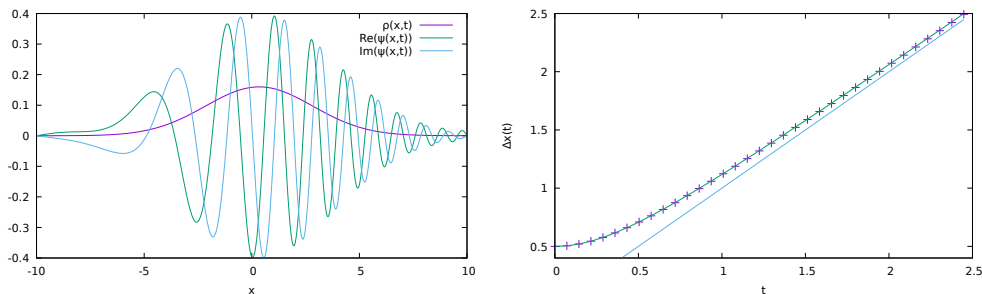
Πιο απλό είναι να κάνουμε τη γραφική παράσταση ενός στιγμιότυπου της κυματοσυνάρτησης. Αυτό μπορεί να γίνει αποθηκεύοντας στιγμιότυπα σε ξεχωριστά αρχεία και κάνοντας τη γραφική τους παράσταση με την `awk`, όπως δεί-

⁵Για να γίνει όπως στο Σχήμα 1.2 έχουμε κάνει `splot with lines` αφού δώσαμε τις εντολές `set hidden3d; set pm3d;`, αλλά αυτό θα σας απορροφήσει πολλούς υπολογιστικούς πόρους.

ξάμε παραπάνω, ή επιλέγοντας τα στιγμιότυπα με το κατάλληλο φίλτρο μέσα από το `gnuplot`:

```
gnuplot> plot \
  "<awk '$2 > 0.0{p=1; print }p==1&&NF<1{ exit }' psi" u 3:4 w l, \
  "<awk '$2 > 0.3{p=1; print }p==1&&NF<1{ exit }' psi" u 3:4 w l, \
  "<awk '$2 > 1.0{p=1; print }p==1&&NF<1{ exit }' psi" u 3:4 w l, \
  "<awk '$2 > 2.4{p=1; print }p==1&&NF<1{ exit }' psi" u 3:4 w l
```

Η παραπάνω εντολή θα φτιάξει τη δεξιά γραφική παράσταση του Σχήματος 1.2.



Σχήμα 1.3: Αριστερά φαίνονται οι $\rho(x, t)$, $R(x, t)$, $I(x, t)$, για $t = 2.4$ για το ελεύθερο σωματίο, όπως υπολογίστηκε από το πρόγραμμα `tdse_fd.f90` στη σελίδα 14. Δεξιά υπολογίζεται η διασπορά $\Delta x(t)$ (διακριτά σημεία) τα οποία συγκρίνονται με τη σχέση (1.50) και την ασυμπτωτική ευθεία $t/(2\sigma)$.

Με παρόμοιες εντολές μπορούμε να φτιάξουμε και τις γραφικές παραστάσεις του πραγματικού και του φανταστικού μέρους της κυματοσυνάρτησης για κάποια χρονική στιγμή. Με τις παρακάτω εντολές μπορούμε να φτιάξουμε τη γραφική παράσταση του Σχήματος (1.3)

```
gnuplot> plot \
  "<awk '$2 > 2.4{p=1; print }p==1&&NF<1{ exit }' psi" u 3:4 w l, \
  "<awk '$2 > 2.4{p=1; print }p==1&&NF<1{ exit }' psi" u 3:5 w l, \
  "<awk '$2 > 2.4{p=1; print }p==1&&NF<1{ exit }' psi" u 3:6 w l
```

Με τους παραπάνω υπολογισμούς μπορούμε να δούμε μια βασική ιδιότητα της κατάστασης ενός ελεύθερου σωματιδίου που δίνεται από ένα εντοπισμένο κυματοπακέτο, όπως αυτό της εξίσωσης (1.25). Το κυματοπακέτο εξαπλώνεται απεριόριστα με το χρόνο και το σωματίδιο εντοπίζεται σε ολοένα και μεγαλύτερο διάστημα. Αυτό εκφράζεται ποσοτικά από τη διασπορά $\Delta x(t) =$

$\sqrt{\langle x^2 \rangle(t) - (\langle x \rangle(t))^2}$, η οποία μπορεί να δειχθεί ότι είναι⁶

$$\Delta x(t) = \frac{t}{2\sigma} \sqrt{1 + \frac{4\sigma^4}{t^2}}. \quad (1.50)$$

Για αρκετά μεγάλους χρόνους, η διασπορά αυξάνεται ανάλογα με τον χρόνο και αυτό μπορούμε να το δούμε στην αριστερή γραφική παράσταση του Σχήματος 1.4 όπου φαίνεται η εξάπλωση του κυματοπακέτου. Η σχέση μπορεί να ελεγχθεί και ποσοτικά αν κάνουμε έναν γρήγορο υπολογισμό⁷ της αβεβαιότητας $\Delta x(t)$. Από τη σχέση (1.11) έχουμε τις σχέσεις $\langle x \rangle = \int_{-x_{\max}}^{+x_{\max}} x \rho(x, t) dx$, $\langle x^2 \rangle = \int_{-x_{\max}}^{+x_{\max}} x^2 \rho(x, t) dx$, και το παρακάτω πρόγραμμα, γραμμένο σε awk⁸, υπολογίζει τις τιμές $(t, \langle x \rangle(t), \langle x^2 \rangle(t), \Delta x(t))$:

```
#!/usr/bin/awk -f
# -----
# When the line has data: NF>1 (in our case NF=6)
NF > 1 {
  t = $2;          # current time
  x += $3 * $4;    # Σ_i x * ρ (x, t)
  x2 += $3 * $3 * $4; # Σ_i x * x * ρ (x, t)
}
# A blank line separates datasets of different time:
NF < 1 {
  dx = 0.02;      # put here the value of dx
  x *= dx;        # ~ ∫ x * ρ (x, t) * dx
  x2 *= dx;       # ~ ∫ x * x * ρ (x, t) * dx
  DX = sqrt(x2 - x * x); # Δx = sqrt( <x*x> - <x>* <x> )
  print t, x, x2, DX;
  x = 0; x2 = 0;  # reset sums for the next dataset
}
```

Το παραπάνω πρόγραμμα μπορείτε να το βρείτε στο συνοδευτικό λογισμικό στο αρχείο `tdse_fd_DX.awk`. Αν το γράψετε σε δικό σας αρχείο, θα πρέπει πρώτα να του δώσετε άδεια εκτέλεσης:

```
chmod a+x tdse_fd_DX.awk
```

και μετά να το τρέξετε:

⁶Δείτε τις εξισώσεις (1.93).

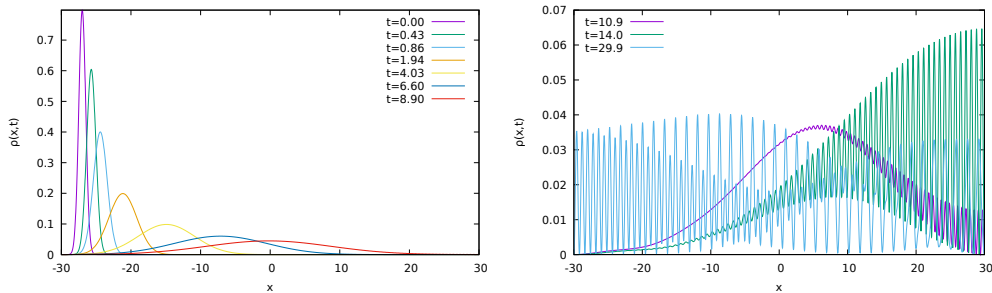
⁷Σε επόμενη ενότητα θα κάνουμε πιο συστηματική μελέτη υπολογισμού αναμενόμενων τιμών.

⁸Το πρόγραμμα αυτό μπορεί να γραφτεί σε μια γραμμή awk `'NF>1 t=$2; x+=$3*$4; x2+= $3*$3*$4 NF<1 dx=0.02; x*=dx; x2*=dx; DX=sqrt(x2-x*x) ;print t,x,x2,DX; x=0; x2=0'` και να χρησιμοποιηθεί από τη γραμμή εντολών. Αν προτιμάτε, μπορείτε να ενσωματώσετε τον υπολογισμό στον πηγαίο κώδικα `tdse_fd.f90`.

```
> ./tdse_fd_DX.awk psi > DX.dat
gnuplot> plot "DX.dat" using 1:4 with lines
```

Το αποτέλεσμα φαίνεται στην δεξιά γραφική παράσταση του Σχήματος 1.3. Παρόλη την απλοϊκότητα του υπολογισμού, η συμφωνία με τη σχέση (1.50) είναι πολύ καλή. Στο ίδιο σχήμα φαίνεται η ασυμπτωτική συμπεριφορά $\Delta x(t) \sim t/(2\sigma)$ καθώς το $t \rightarrow \infty$. Για να φτιάξετε το σχήμα αυτό, χρησιμοποιώντας το πρόγραμμα που γράψατε στο αρχείο `tdse_fd_DX.awk`, εκτελέστε τις παρακάτω εντολές στο `gnuplot`:

```
gnuplot> DT(t) = sqrt(s*s+(t/(2*s))**2)
gnuplot> asympt(t) = t/(2*s)
gnuplot> s = 0.5
gnuplot> plot "<./tdse_fd_DX.awk psi" u 1:4,DT(x),asympt(x)
```



Σχήμα 1.4: Η πυκνότητα πιθανότητας $\rho(x,t)$, όπως υπολογίστηκε από το πρόγραμμα `tdse_fd.f90` για $V_i = 0$. Στο αριστερό σχήμα βλέπουμε την εξάπλωση του κυματοπακέτου όσο το σωματίο κινείται, πρακτικά ελεύθερο, καθώς περνάει ο χρόνος. Στο δεξί σχήμα βλέπουμε το αποτέλεσμα των ανακλάσεων της κυματοσυνάρτησης στα τοιχώματα $V(\pm x_{\max}) = +\infty$, $x_{\max} = 30$.

Όπως είπαμε και παραπάνω, λόγω των συνοριακών συνθηκών (1.38), το σωματίο δεν είναι ελεύθερο, αλλά βρίσκεται σε ένα απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού (1.39) πλάτους $2x_{\max}$. Άρα από κάποια χρονική στιγμή και μετά⁹ η κυματοσυνάρτηση θα ανακλάται στα τοιχώματα και τα κύματα που κινούνται σε αντίθετες κατευθύνσεις θα συμβάλλουν. Το αποτέλεσμα της συμβολής φαίνεται στη δεξιά γραφική παράσταση του Σχήματος 1.4.

⁹Εκτιμήστε την από το γεγονός ότι, όσο το σωματίο είναι (κατά προσέγγιση) ελεύθερο, $\langle v \rangle(t) = \langle p \rangle(t) = k_0$.

1.5 Σκέδαση

Στην ενότητα αυτή θα μελετήσουμε τη σκέδαση ενός σωματιδίου σε ένα τετραγωνικό δυναμικό. Θα ξεκινήσουμε με τη μελέτη ενός φράγματος που δίνεται από το δυναμικό:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| < b \\ 0 & |x| > b \end{cases}, \quad (1.51)$$

με $V_0 > 0$. Όπως γνωρίζουμε από την κβαντομηχανική, μέρος της κυματοσυνάρτησης ανακλάται και μέρος της συνεχίζει να διαδίδεται. Στην περίπτωση που το σωματίο έχει καθορισμένη ενέργεια E , μη μηδενική διάδοση συμβαίνει ακόμα και αν $E < V_0$ λόγω του φαινομένου σήραγγας, ενώ μη μηδενική ανάκλαση συμβαίνει ακόμα και αν $E > V_0$. Το κυματοπακέτο που δίνεται από τη σχέση (1.25) είναι υπέρθεση ιδιοκαταστάσεων όλων των δυνατών ενεργειών¹⁰, οπότε αναμένεται μέρος του να συνεχίσει τη διάδοση και μέρος του να ανακλαστεί.

Θα μελετήσουμε την περίπτωση $V_0 = 6$, $b = 0.5$. Μεταβάλλουμε τον κώδικα στο αρχείο `tdse_fd.f90` στο σημείο που υπολογίζεται το δυναμικό ως εξής:

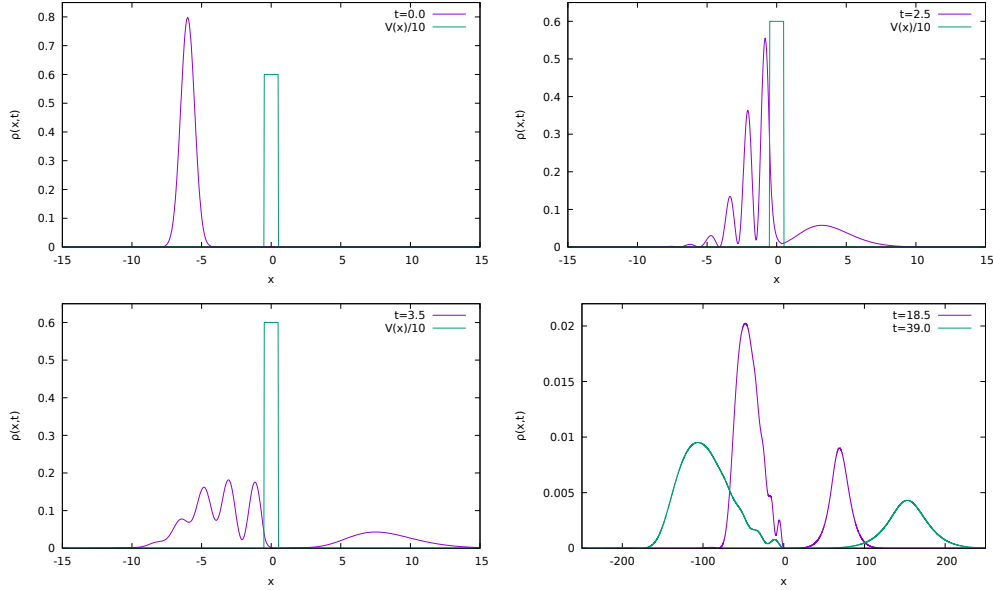
```
!
! Potential:
V      = 0.0D0
do ix  = 1, Nx
  x     = -xmax + (ix-1)*dx
  if (ABS(x) <= 0.5D0 ) V(ix) = 6.0D0
end do
```

Για να δούμε κυρίως τα φαινόμενα σκέδασης από το φράγμα (1.51), πρέπει να επιλέξουμε τις παραμέτρους x_0 , σ , x_{\max} , t_{\max} , έτσι ώστε να ελαχιστοποιήσουμε τα φαινόμενα της αλληλεπίδρασης (ανάκλαση/συμβολή) του κυματοπακέτου με τα τοιχώματα του πηγαδιού στα $x = \pm x_{\max}$. Επιλέγοντας

```
> echo -6 0.5 3.0 0.02 0.45 300 40 1000 |./t
# Enter x0, sigma, k0, dx, a, xmax, tmax, tskip:
....
```

μπορούμε να δούμε τη σκέδαση του αρχικού κυματοπακέτου, όπως φαίνεται στα στιγμιότυπα του Σχήματος 1.5. Με την επιλογή $k_0 = 3$, η μέση αρχική ορμή του σωματιδίου $\langle p \rangle = \langle v \rangle = 3$, η μέση ορμή του τετραγώνου της ορμής $\langle p^2 \rangle = k_0^2 + 1/(4\sigma^2) = 10$, άρα η μέση τιμή της ενέργειας είναι $\langle H \rangle = \langle p^2 \rangle/2 = 5$.

¹⁰Φυσικά δεν συνεισφέρουν όλες οι ενεργειακές ιδιοκαταστάσεις το ίδιο, κυρίως συνεισφέρουν αυτές με ενέργεια γύρω από τη μέση τιμή $\langle H \rangle = \langle p^2 \rangle/2$ που δίνεται από την (1.28).



Σχήμα 1.5: Σκέδαση από το φράγμα δυναμικού που δίνεται από την εξίσωση (1.51) με $V_0 = 6$, $b = 0.5$. Επάνω αριστερά φαίνεται η αρχική κατάσταση πριν την σκέδαση. Τα δύο επόμενα σχήματα δείχνουν δύο στιγμιότυπα της σκέδασης, ενώ κάτω δεξιά τα διαδιδόμενα και ανακλώμενα κυματοπακέτα έχουν πρακτικά χωριστεί.

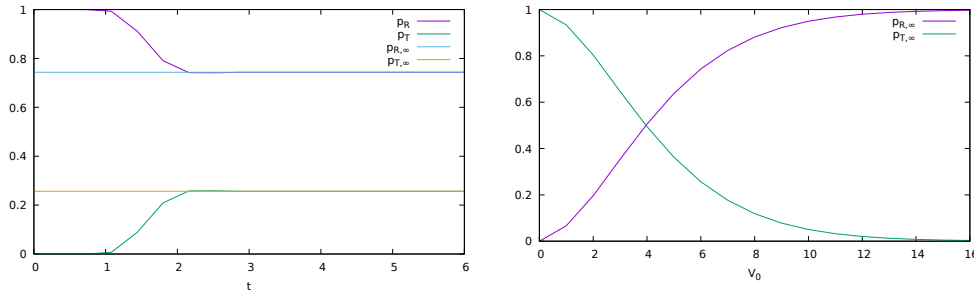
Άρα $\langle H \rangle < V_0 = 6$, τιμή η οποία θα μειωθεί περαιτέρω με το άπλωμα του κυματοπακέτου (αύξηση σ). Αν θεωρήσουμε ένα ανάπτυγμα του κυματοπακέτου στη βάση των ενεργειακών ιδιοκαταστάσεων, τότε οι συνιστώσες με ενέργεια $E < V_0$ θα συνεισφέρουν στη διάδοση μέσω του φαινομένου της σήραγγας (εκθετική μείωση). Οι υπόλοιπες, με $E > V_0$, θα διαδίδονται μέσα στο φράγμα με μήκος κύματος $k = 2\pi/\lambda = \sqrt{2(E - V_0)}$.

Μετά από αρκετό χρόνο από τη σκέδαση, τα ανακλώμενα και διαδιδόμενα κυματοπακέτα διαδίδονται πρακτικά ανεξάρτητα το ένα από το άλλο. Τότε μπορούμε να ρωτήσουμε ποια είναι η πιθανότητα το σωματίδιο να έχει ανακλαστεί ή να έχει περάσει το φράγμα. Αν $p_{R,\infty}$ είναι η πιθανότητα να ανακλαστεί και $p_{T,\infty}$ να το περάσει, τότε θα έχουμε

$$p_{R,\infty} = \lim_{t \rightarrow +\infty} \int_{-x_{\max}}^0 \rho(x, t) dx$$

$$p_{T,\infty} = \lim_{t \rightarrow +\infty} \int_0^{+x_{\max}} \rho(x, t) dx. \quad (1.52)$$

Το παρακάτω πρόγραμμα, γραμμένο σε awk, υπολογίζει τα αθροίσματα $p_R(t_n) \approx \sum_{x_i < 0} \rho_i^n \Delta x$ και $p_T(t_n) \approx \sum_{x_i > 0} \rho_i^n \Delta x$, τα οποία μπορούμε να δούμε γραφικά, όπως στο Σχήμα 1.6:



Σχήμα 1.6: (Αριστερά) Σκέδαση από το φράγμα δυναμικού που δίνεται από την εξίσωση (1.51) με $V_0 = 6, b = 0.5, k_0 = 3, \sigma = 0.5$. $p_R(t) = \int_{-x_{\max}}^0 \rho(x, t) dx$, $p_T(t) = \int_0^{+x_{\max}} \rho(x, t) dx$, $p_{R, \infty} = p_R(+\infty) = 0.743346$, $p_{T, \infty} = p_T(+\infty) = 0.256654$. (Δεξιά) Η εξάρτηση των $p_{R, \infty}$, $p_{T, \infty}$ από το ύψος του φράγματος V_0 . Όλες οι άλλες παράμετροι είναι οι ίδιες.

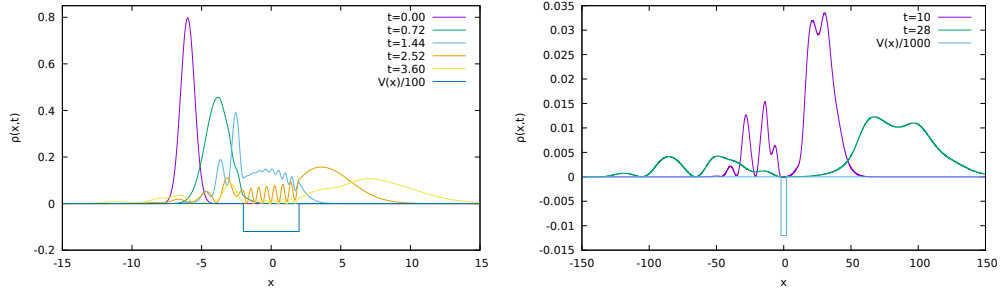
```
#!/usr/bin/awk -f
# -----
NF > 1 {
  t  = $2;
  x  = $3;
  rho = $4;
  if (x < 0) R += rho;
  if (x > 0) T += rho;
}
# A blank line separates datasets of different time:
NF < 1 {
  dx = 0.02;      # put here the value of dx
  R  *= dx;       # ~ ∫ ρ (x, t) * dx
  T  *= dx;
  print t, R, T;
  R = 0; T = 0;   # reset sums for the next dataset
}
```

Στο Σχήμα αυτό βλέπουμε πως τα $p_{R,T}(t_n)$ συγκλίνουν για $t > 2.2$ και μπορούμε εύκολα να υπολογίσουμε τα όρια $p_{R, \infty}$ και $p_{T, \infty}$. Συμπεραίνουμε πως η πιθανότητα το σωματίο να περάσει το φράγμα μετά από αρκετά μεγάλο χρόνο είναι περίπου $1/4$.

Για δεδομένο αρχικό κυματοπακέτο, οι πιθανότητες $p_{R, \infty}$ και $p_{T, \infty}$ εξαρτώνται από τις παραμέτρους V_0 και b . Κρατώντας το b σταθερό, η αύξηση του V_0 οδηγεί σε αύξηση του $p_{R, \infty}$, μέχρι να έχουμε σχεδόν ολική ανάκλαση. Αυτό μπορεί να γίνει κατανοητό αν θεωρήσουμε το ανάπτυγμα της κυματοσυνάρτησης σε γραμμικό συνδυασμό ενεργειακών ιδιοκαταστάσεων, όπως στην εξίσωση (1.10). Οι καταστάσεις με ενέργεια $E < V_0$ διαδίδονται μέσω του φράγματος λόγω του φαινομένου σήραγγας. Οι κυματοσυναρτήσεις τους έχουν μέτρο που

ελαττώνεται εκθετικά καθώς διειδύει σε απόσταση d μέσα στο φράγμα ως e^{-kd} με $k = \sqrt{2(V_0 - E)}$. Άρα, για τις καταστάσεις αυτές, το μήκος διείσδυσης είναι $d_{\max} \sim 1/k$, το οποίο μειώνεται καθώς αυξάνει το V_0 . Επίσης, όταν $\langle H \rangle \ll V_0$, οι καταστάσεις με $E > V_0$ έχουν αμελητέες συνιστώσες στην εξίσωση (1.10) και το φαινόμενο σήραγγας είναι αυτό που επικρατεί στη διάδοση. Αντίθετα, μείωση του V_0 οδηγεί σε αύξηση του $p_{T,\infty}$, έως να έχουμε $V_0 = 0$, οπότε έχουμε ολική διάδοση. Στο δεξί Σχήμα 1.6 βλέπουμε την εξάρτηση αυτή από το V_0 .

Με τον ίδιο τρόπο, κρατώντας το V_0 σταθερό, η αύξηση του b μειώνει την $p_{T,\infty}$, μέχρι οι συνιστώσες με $E < V_0$ σχεδόν να μην διαδίδονται, και να έχουμε διάδοση μόνο των $E > V_0$ συνιστωσών.



Σχήμα 1.7: Σκέδαση από το πηγάδι δυναμικού που δίνεται από την εξίσωση (1.51) με $V_0 = -12$, $b = 2$.

Τέλος, μπορούμε να μελετήσουμε και τη σκέδαση από ένα πηγάδι δυναμικού, θέτοντας στην (1.51) $V_0 < 0$. Στο Σχήμα 1.7 φαίνονται στιγμιότυπα της πυκνότητας πιθανότητας $\rho(x, t)$, όταν $V_0 = -12$, $b = 2$. Αν θεωρήσουμε ένα ανάπτυγμα (1.10) του κυματοπακέτου στη βάση των ενεργειακών ιδιοκαταστάσεων, τότε μέσα στο πηγάδι οι συνιστώσες με ενέργεια E θα διαδίδονται με μήκος κύματος $k = 2\pi/\lambda = \sqrt{2(E - V_0)}$.

1.6 Ο Αρμονικός Ταλαντωτής

Ο απλός αρμονικός ταλαντωτής, όταν τα μεγέθη κανονικοποιηθούν στις μονάδες που δίνονται από τις (1.22), δίνεται από τη συνάρτηση δυναμικού

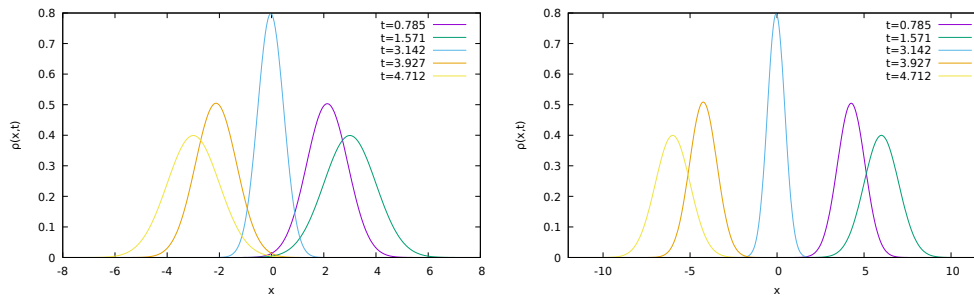
$$V(x) = \frac{1}{2}x^2. \quad (1.53)$$

Αφού προγραμματίσουμε τις τιμές $V(ix)$ στο αρχείο `tdse_fd.f90`, όπως δείξαμε στη σελίδα 9, και μεταγλωττίσουμε, μπορούμε εκτελέσουμε την εντολή:

```
> echo 0 0.5 3 0.02 0.45 15 7 40 | ./t
```

```
# Enter x0, sigma, k0, dx, a, xmax, tmax, tskip:
...
```

Στη συνέχεια μπορούμε να μελετήσουμε γραφικά την κυματοσυνάρτηση και την πυκνότητα πιθανότητας, όπως και στις προηγούμενες ενότητες. Παρατηρούμε ότι η $\rho(x, t)$ είναι περιοδική συνάρτηση του χρόνου, με περίοδο που καθορίζεται από την επιλογή $\omega = 1$. Η διασπορά του κυματοπακέτου δεν αυξάνει διαρκώς με τον χρόνο, όπως στην περίπτωση του ελεύθερου σωματίου, αλλά είναι και αυτή περιοδική συνάρτηση του χρόνου. Είναι ελάχιστη στο σημείο ισορροπίας και μέγιστη στη θέση μέγιστης απομάκρυνσης. Από την αρχή απροσδιοριστίας του Heisenberg συμπεραίνουμε πως η διασπορά στις τιμές της ορμής είναι μέγιστη στο σημείο ισορροπίας, όπου έχουμε τη μέγιστη μέση ορμή, και ελάχιστη στη μέγιστη απομάκρυνση, όπου η μέση ορμή είναι μηδέν. Στο αριστερό Σχήμα (1.8) βλέπουμε στιγμιότυπα της $\rho(x, t)$ για $t \approx T/8, T/4, T/2, 5T/8$ και $3T/4$.

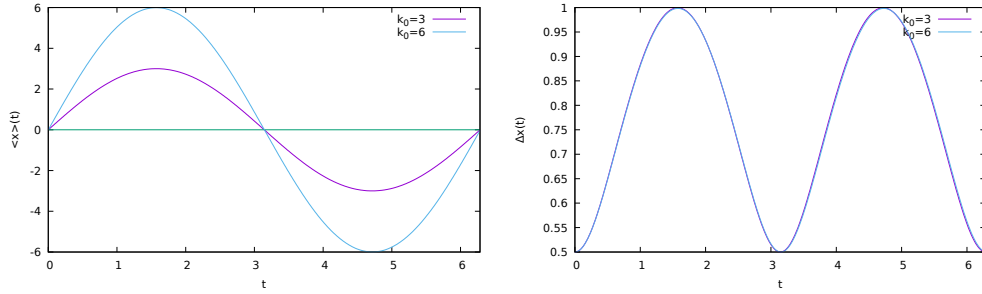


Σχήμα 1.8: Η πυκνότητα πιθανότητας $\rho(x, t)$ για τον απλό αρμονικό ταλαντωτή, η οποία είναι περιοδική συνάρτηση του χρόνου με περίοδο $T = 2\pi/\omega = 2\pi$. Τα στιγμιότυπα είναι για $t \approx T/8, T/4, T/2, 5T/8$ και $3T/4$. (Αριστερά) Η $\psi(x, 0)$ είναι η (1.25) με $k_0 = 3, \sigma = 0.5, x_0 = 0$. (Δεξιά) Η $\psi(x, 0)$ είναι η (1.25) με $k_0 = 6, \sigma = 0.5, x_0 = 0$.

Στη συνέχεια διπλασιάζουμε την k_0 , την αρχική μέση ορμή της $\psi(x, 0)$. Το αποτέλεσμα το βλέπουμε στο δεξί Σχήμα (1.8). Το πλάτος της ταλάντωσης φαίνεται ότι έχει διπλασιαστεί, ενώ τα υπόλοιπα ποιοτικά χαρακτηριστικά της $\rho(x, t)$ παραμένουν τα ίδια.

Στη συνέχεια μπορούμε να υπολογίσουμε τις αναμενόμενες τιμές $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$ και την αβεβαιότητα $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$, όπως στη σελίδα 17. Στο Σχήμα 1.9 βλέπουμε τα αποτελέσματα για τις συναρτήσεις $\langle x \rangle(t)$ και $\Delta x(t)$. Η $\langle x \rangle(t)$ είναι ημιτονοειδής συνάρτηση του χρόνου με περίοδο $T = 2\pi/\omega = 2\pi$ και πλάτους k_0 . Η $\Delta x(t)$ είναι επίσης περιοδική συνάρτηση του χρόνου με περίοδο $T/2 = \pi$. Παρατηρούμε ότι οι τιμές της είναι φραγμένες στο διάστημα $[1/2, 1]$, άρα το κυματοπακέτο δεν απλώνεται απεριόριστα, όπως στην περίπτωση του ελεύθερου σωματιδίου.

Τα παραπάνω αποτελέσματα είναι αναμενόμενα. Οι συναρτήσεις $\langle x \rangle(t)$ και



Σχήμα 1.9: (Αριστερά) Η αναμενόμενη τιμή $\langle x \rangle(t)$ για τον απλό αρμονικό ταλαντωτή με αρχική κατάσταση την (1.25) με $\sigma = 0.5$, $x_0 = 0$. Η αναμενόμενη τιμή $\langle x \rangle(t)$ είναι περιοδική με περίοδο $T = 2\pi/\omega = 2\pi$ και με πλάτος k_0 , και είναι ίδια με την απομάκρυνση $x(t)$ του κλασικού αρμονικού ταλαντωτή. (Δεξιά) Η αβεβαιότητα στη θέση $\Delta x(t)$ για τις δύο περιπτώσεις του αριστερού σχήματος, η οποία είναι ανεξάρτητη του k_0 .

$\Delta x(t)$ υπολογίζονται στο Παράρτημα 1.8.3, όπου δείχνεται ότι είναι¹¹:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle(t) &= k_0 \sin t \\ (\Delta x(t))^2 &= \frac{1}{2} \left(\sigma^2 - \frac{1}{4\sigma^2} \right) \cos 2t + \frac{1}{2} \left(\sigma^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right). \end{aligned} \quad (1.54)$$

Η σύγκριση των τιμών που δείχνονται στο Σχήμα (1.9) με τις παραπάνω σχέσεις, αφήνεται ως άσκηση στον αναγνώστη.

1.7 Μετρήσεις

Στις προηγούμενες ενότητες υπολογίσαμε αναμενόμενες τιμές φυσικών ποσοτήτων που είναι συνάρτηση της θέσης, όπως την $\langle x \rangle$ και την $\langle x^2 \rangle$. Το ολοκλήρωμα (1.11) προσεγγίστηκε από το άθροισμα $\langle x^a \rangle \approx \sum_i x_i^a \rho_i^n \Delta x$ και είδαμε πως η προσέγγιση αυτή μας έδωσε αρκετά καλά αποτελέσματα. Στην ενότητα αυτή θα υπολογίσουμε αναμενόμενες τιμές φυσικών ποσοτήτων που είναι συναρτήσεις και της ορμής, όπως λ.χ. τις $\langle p \rangle$, $\langle p^2 \rangle$ και $\langle H \rangle$. Επειδή $p = -i\partial/\partial x$, υπολογισμός αυτός χρειάζεται εκτιμητές παραγώγων της κυματοσυνάρτησης $\psi(x, t)$.

Θα ακολουθήσουμε την προσέγγιση του Κεφαλαίου 10 και ο αναγνώστης θα πρέπει να μελετήσει την ενότητα 10.4. Οι αλλαγές που χρειάζεται να κάνουμε στο πρόγραμμα που βρίσκεται στο αρχείο `observables.f90` είναι λίγες: Κυρίως πρέπει να λάβουμε υπόψη πως οι κυματοσυναρτήσεις που θα ολοκληρώσουμε είναι μιγαδικές συναρτήσεις. Τον υπολογισμό των αναμενόμενων τιμών θα τον απομονώσουμε σε μία subroutine

¹¹Δείτε τις σχέσεις (1.96), (1.113).

```

subroutine      observables(  psi,V,Nx,xmin,dx,  avX,avP,avX2,&
                                avP2,avE,DX2,DP2)
  complex(8), dimension(Nx) :: psi
  ...

```

στην οποία ο χρήστης της πρέπει να δώσει ένα μιγαδικό array $\psi(Nx)$, όπου για δεδομένο t_n , $\psi(x_i, t_n) \rightarrow \text{psi}(i)$. Στην έξοδο παίρνει τις αναμενόμενες τιμές $\langle x \rangle \rightarrow \text{avX}$, $\langle p \rangle \rightarrow \text{avP}$, $\langle x^2 \rangle \rightarrow \text{avX2}$, $\langle p^2 \rangle \rightarrow \text{avP2}$, $\langle H \rangle \rightarrow \text{avE}$, $(\Delta X)^2 \rightarrow \text{DX2}$, $(\Delta P)^2 \rightarrow \text{DP2}$. Παρατηρήστε πως στο πρόγραμμα αυτό, πρέπει να λάβουμε υπόψη ότι η κυματοσυνάρτηση παίρνει μιγαδικές τιμές, και $\psi^*(x_i, t_n) = \text{DCONJG}(\text{psi}(i))$. Επίσης παρατηρήστε πως, επειδή οι αναμενόμενες τιμές ερμιτιανών τελεστών είναι πραγματικές, οι παραπάνω μεταβλητές ορίζονται να είναι πραγματικές και το πρόγραμμα επιστρέφει το πραγματικό μέρος του ολοκληρώματος (1.11). Το πλήρες πρόγραμμα παρατίθεται παρακάτω και μπορεί να βρεθεί στο αρχείο `observables.f90` στο συνοδευτικό λογισμικό.

```

!-----
subroutine      observables(psi,V,Nx,xmin,dx, &
                                avX,avP,avX2,avP2,avE,DX2,DP2)
  implicit none
  integer          :: Nx
  real    (8)      :: dx,xmin
  complex(8), dimension(Nx) :: psi
  real    (8), dimension(Nx) :: V
  complex(8), allocatable  :: obs(:),x(:)
  complex(8)          :: integral
  real    (8)          :: avX,avX2,avP,avP2,avV
  real    (8)          :: avE,DX2,DP2,norm
  integer          :: i
  complex(8), parameter  :: IMU=(0.0D0,1.0D0)
!-----
  ALLOCATE(obs(Nx),x(Nx))
!-----
!Define values of x:
  do i = 1, Nx
    x(i) = xmin + (i-1)*dx
  end do
!-----
!Norm of psi:
  obs = psi * DCONJG(psi)
  call integrate(obs,dx,Nx,integral)
  norm = DBLE(integral)
  psi = psi / norm
!-----
!<x>
  obs = psi * x * DCONJG(psi)

```

```

call integrate(obs,dx,Nx,integral)
avX = DBLE(integral)
!
!<p>
obs(1) = DCONJG(psi(1))*(psi(2) - psi(1))/dx
do i = 2, Nx - 1
  obs(i) = DCONJG(psi(i))*(psi(i+1) - psi(i-1))/(2.0D0*dx)
end do
obs(Nx) = DCONJG(psi(Nx))*(psi(Nx) - psi(Nx-1))/dx
call integrate(obs,dx,Nx,integral)
avP = DIMAG(integral) ! multiply by -i
!
!<x^2>
obs = psi * x * x * DCONJG(psi)
call integrate(obs,dx,Nx,integral)
avX2= DBLE(integral)
!
!<p^2>
obs(1) = DCONJG(psi(1))*(2.0D0*psi(1) - 5.0D0*psi(2) )&
+ 4.0D0* psi(3) - psi(4) )/(dx*dx)
do i=2,Nx-1
  obs(i) = DCONJG(psi(i) ) &
*(psi(i+1) - 2.0D0*psi(i) + psi(i-1))/(dx*dx)
enddo
obs(Nx) = DCONJG(psi(Nx))*(2.0D0*psi(Nx) - 5.0D0*psi(Nx-1)&
+ 4.0D0* psi(Nx-2) - psi(Nx-3))/(dx*dx)
call integrate(obs,dx,Nx,integral)
avP2=-DBLE(integral)
!
!<V(x)>
obs = psi * V * DCONJG(psi)
call integrate(obs,dx,Nx,integral)
avV = DBLE(integral)
!
!<E>
avE = 0.5D0 * avP2 + avV
!
!Uncertainties: DX2, DP2:
DX2 = avX2 - avX * avX
DP2 = avP2 - avP * avP
!
DEALLOCATE(obs,x)
end subroutine observables
!
!
subroutine integrate(psi,dx,N,integral)
implicit none
integer :: N
complex(8) :: psi(N), integral, int

```

```

real      (8)  :: dx
integer   :: Nx, i
!-----
!Nx must be odd:
Nx = N; if(MOD(N,2) == 0) Nx = N-1
!-----
!zeroth order point:
i      = 1
int    = psi(i)
!-----
!odd order points (i=k+1 is even):
do i = 2,Nx-1,2
  int = int + 4.0D0*psi(i)
enddo
!-----
!even order points:
do i=3,Nx-2,2
  int = int + 2.0D0*psi(i)
enddo
!-----
!last point:
i      = Nx
int    = int + psi(i)
!-----
!measure normalization:
int    = int*dx/3.0D0
!-----
!If N is even, we add the last point:
if(MOD(N,2) == 0) int = int + psi(N)*dx
!-----
!----- final result:
integral = int
end subroutine integrate
!-----

```

Στο κυρίως πρόγραμμα πρέπει να κάνουμε μικρές μεταβολές. Οι πιο σημαντικές αφορούν τον ορισμό της κυματοσυνάρτησης. Αντί για τον ορισμό (1.37), θα χρησιμοποιήσουμε τον ακριβέστερο ορισμό που δίνεται από τη σχέση (1.116)

$$\psi_i^n = R_i^n + \frac{i}{2}(I_i^n + I_i^{n-1}). \quad (1.55)$$

Αυτό μπορεί να γίνει με την εντολή

```
psi=DCMPLX(repsi(new,:),0.5D0*(impsi(new,)+impsi(old,)))
```

όπου η σταθερά new δίνει τις συναρτήσεις στο νέο βήμα και η old στο προηγούμενο. Οι αλλαγές που πρέπει να γίνουν φαίνονται παρακάτω. Το πρόγραμμα

μπορεί να βρεθεί στο αρχείο `tdse_fd_obs.f90` στο συνοδευτικό λογισμικό.

```

complex(8), dimension( P ) :: psi
real      (8)                :: avX, avP, avX2, avP2, avE, DX2, DP2
...
open(unit=f_obs, file='obs')
...
!-----
!Begin loop on time evolution:
do it = 1, Nt
  ....
  if(MOD(it,tskip) == 0)then ! make a measurement
    ...
    psi=DCMPLX(repsi(new,:), 0.5D0*(impsi(new,)+impsi(old,)))
    call observables(psi,V,Nx,xmin,dx, &
                    avX,avP,avX2,avP2,avE,DX2,DP2) &
    write (f_obs,101) it, t, &
                    avX,avP,avX2,avP2,avE,DX2,DP2 &
  end if
  ....
end do

```

Το πρόγραμμα μπορεί να μεταγλωτιστεί με την εντολή

```
> gfortran tdse_fd_obs.f90 observables.f90 -o t
```

και τρέχει ακριβώς όπως και το πρόγραμμα που έχουμε χρησιμοποιήσει μέχρι τώρα. Τα αποτελέσματα βρίσκονται στο αρχείο `obs` και μπορείτε να τα δείτε με το `gnuplot`:

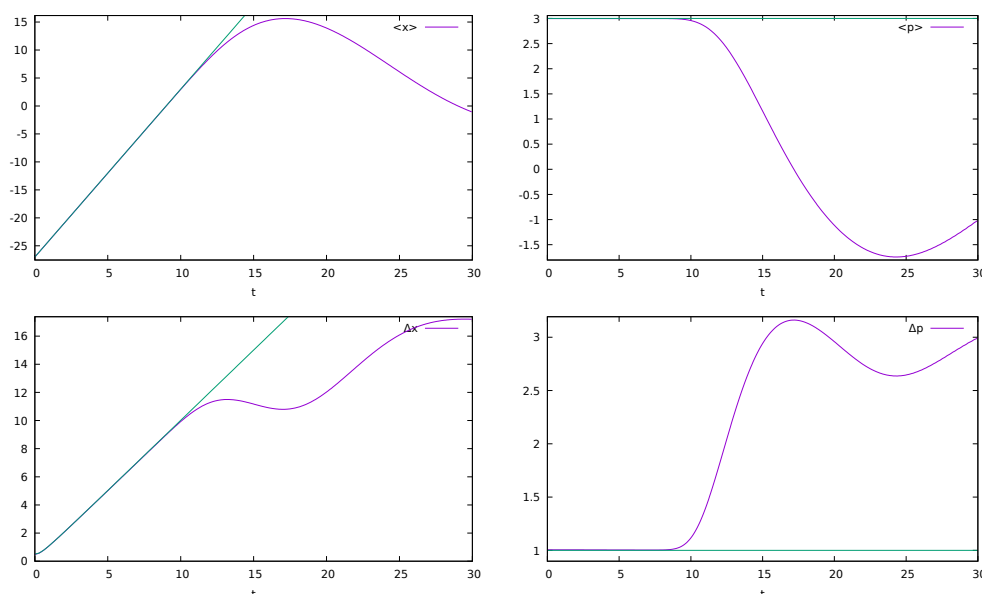
```

gnuplot> plot "obs" using 2:3 with lines title "<x>"
gnuplot> plot "obs" using 2:4 with lines title "<p>"
gnuplot> plot "obs" using 2:5 with lines title "<x^2>"
gnuplot> plot "obs" using 2:6 with lines title "<p^2>"
gnuplot> plot "obs" using 2:7 with lines title "<H>"
gnuplot> plot "obs" using 2:8 with lines title "Dx^2"
gnuplot> plot "obs" using 2:9 with lines title "Dp^2"
gnuplot> plot "obs" using 2:(sqrt($8*$9)) w l t "Dx Dp"

```

Ας θεωρήσουμε πρώτα το σωματίο της ενότητας 1.4, και ειδικότερα αυτό που μελετήθηκε στο Σχήμα 1.4. Το κυματοπακέτο που περιγράφει την κατάσταση του κινείται πρακτικά ελεύθερο για $t \lesssim 8$, ενώ μετά αλληλεπιδρά με τα τοιχώματα του πηγαδιού στις θέσεις $x = \pm x_{\max}$.

Για το ελεύθερο σωματίο, το οποίο βρίσκεται αρχικά στην κατάσταση (1.25),



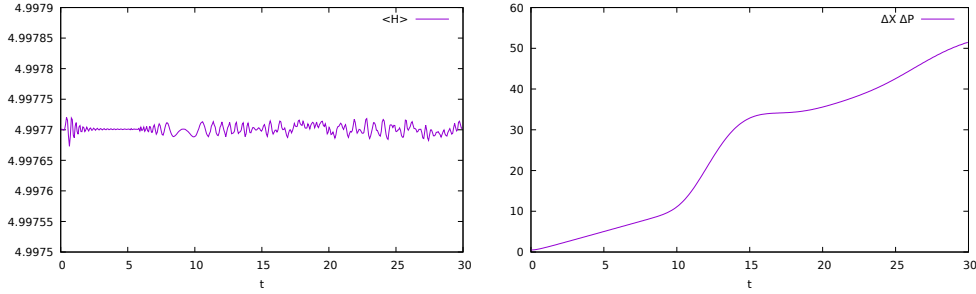
Σχήμα 1.10: Οι αναμενόμενες τιμές $\langle x \rangle(t)$, $\langle p \rangle(t)$ και οι αβεβαιότητες $\Delta x(t)\Delta p(t)$ για το ελεύθερο σωματίο με $x_0 = -27$, $k_0 = 3$, $\sigma = 0.5$. Οι πράσινες καμπύλες υπολογίζονται από τις σχέσεις (1.56), οι οποίες αποκλίνουν από τα αριθμητικά αποτελέσματα για $t \gtrsim 8$. Αυτό γίνεται λόγω των ανακλάσεων του κυματοπακέτου στα τοιχώματα $x = \pm 30$.

η χρονική εξάρτηση των παρακάτω φυσικών ποσοτήτων υπολογίζεται¹² στο Παράρτημα 1.8.3:

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle(t) &= k_0 t + x_0, \\
 \langle p \rangle(t) &= k_0, \\
 \langle H \rangle(t) &= \frac{1}{2} \langle p^2 \rangle(t) = \frac{1}{2} \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right), \\
 \Delta x(t) &= \sqrt{\frac{1}{4\sigma^2} t^2 + \sigma^2}, \\
 \Delta p(t) &= \frac{1}{2\sigma}.
 \end{aligned} \tag{1.56}$$

Ειδικό ενδιαφέρον παρουσιάζει η $\langle H \rangle(t)$, επειδή είναι διατηρούμενη ποσότητα και μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως το μέγεθος που ελέγχει την ακρίβεια του αριθμητικού υπολογισμού. Στο αριστερό Σχήμα 1.11 φαίνεται πως, μέσα στα πλαίσια της αριθμητικής ακρίβειας, η $\langle H \rangle(t)$ παραμένει σταθερή. Στο Σχήμα 1.10 συγκρίνουμε τις φυσικές ποσότητες των (1.56) με τις αριθμητικά υπολογιζόμενες. Παρατηρούμε πως οι τιμές ταυτίζονται μέχρι τα φαινόμενα της ανάκλασης από τα τοιχώματα να γίνουν παρατηρήσιμα για $t \approx 8$.

¹² Δείτε τις σχέσεις (1.88),(1.91),(1.93).



Σχήμα 1.11: Η αναμενόμενη τιμή $\langle H \rangle(t)$ και το γινόμενο των αβεβαιοτήτων $\Delta x(t)\Delta p(t)$ για το ελεύθερο σωματίο με $x_0 = -27$, $k_0 = 3$, $\sigma = 0.5$. Η $\langle H \rangle(t) = \langle H \rangle(0) = 5$ διατηρείται καθόλη τη διάρκεια της κίνησης του σωματιδίου. Η μικρή απόκλιση οφείλεται στο αριθμητικό σφάλμα των υπολογισμών στο `observables.f90`, ενώ οι μικρές διακυμάνσεις στα αριθμητικά σφάλματα της μεθόδου ολοκλήρωσης. Η αύξηση του $\Delta x(t)\Delta p(t)$ αντανακλά το γεγονός ότι το κυματοπακέτο απλώνεται σε ολόκληρο το απειρόβαθο πηγάδι δυναμικού με τοιχώματα στα $x = \pm 30$.

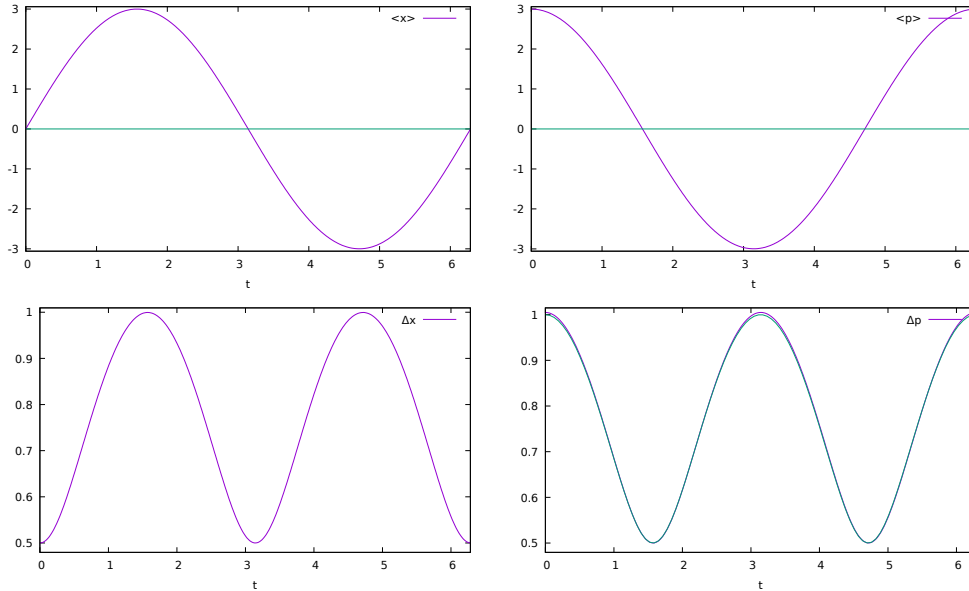
Στη συνέχεια θα μελετήσουμε τον αρμονικό ταλαντωτή, όπως κάναμε και στην ενότητα 1.6, με $x_0 = 0$, $\sigma = 0.5$, $k_0 = 3$, $\Delta x = 0.02$, $a = 0.45$, $x_{\max} = 7$.

Η χρονική εξάρτηση των παρακάτω φυσικών ποσοτήτων, υπολογίζεται¹³ στο Παράρτημα 1.8.3:

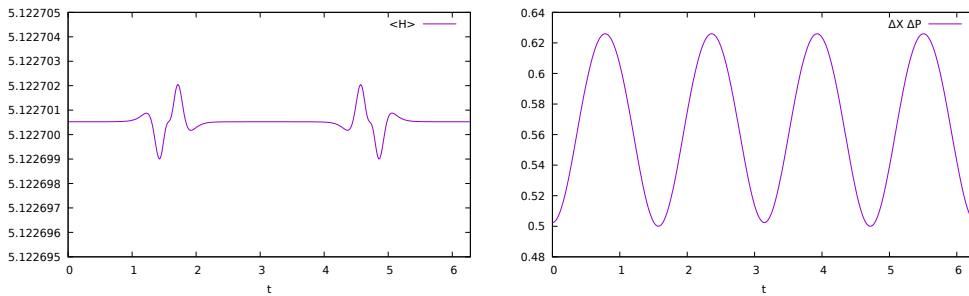
$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle(t) &= k_0 \sin t, \\
 \langle p \rangle(t) &= k_0 \cos t, \\
 \langle H \rangle(t) &= \frac{1}{2}k_0^2 + \frac{1}{2} \left(\sigma^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right), \\
 \Delta x(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{ \left(\sigma^2 - \frac{1}{4\sigma^2} \right) \cos 2t + \left(\sigma^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) }, \\
 \Delta p(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{ - \left(\sigma^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) \cos 2t + \left(\sigma^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) }. \quad (1.57)
 \end{aligned}$$

Στο Σχήμα 1.12 βλέπουμε τη χρονική εξάρτηση των $\langle x \rangle(t)$, $\langle p \rangle(t)$ και των αβεβαιοτήτων $\Delta x(t)\Delta p(t)$, ενώ στο Σχήμα 1.13 τη διατήρηση της $\langle H \rangle(t)$ και το γινόμενο των αβεβαιοτήτων $\Delta x(t)\Delta p(t)$. Παρατηρούμε πως το τελευταίο ταλαντώνεται με περίοδο $T/4$ μεταξύ μιας μέγιστης και μιας ελάχιστης τιμής. Η συμφωνία των αριθμητικών υπολογισμών με τις σχέσεις (1.57) είναι εξαιρετική.

¹³Δείτε τις σχέσεις (1.96),(1.110),(1.113).



Σχήμα 1.12: Οι αναμενόμενες τιμές $\langle x \rangle(t)$, $\langle p \rangle(t)$ και οι αβεβαιότητες $\Delta x(t)\Delta p(t)$ για τον αρμονικό ταλαντωτή με $x_0 = 0$, $k_0 = 3$, $\sigma = 0.5$. Η θεωρητική πρόβλεψη που δίνεται από τη σχέση (1.57) ταυτίζεται με τις καμπύλες που δίνουν οι αριθμητικοί υπολογισμοί, εκτός από την περίπτωση του $\Delta p(t)$ όπου η πράσινη καμπύλη είναι η θεωρητική πρόβλεψη και η μωβ οι αριθμητικοί υπολογισμοί.



Σχήμα 1.13: Η αναμενόμενη τιμή $\langle H \rangle(t)$ και το γινόμενο των αβεβαιοτήτων $\Delta x(t)\Delta p(t)$ για τον αρμονικό ταλαντωτή με $x_0 = 0$, $k_0 = 3$, $\sigma = 0.5$. Η $\langle H \rangle(t) = \langle H \rangle(0) = 5$ διατηρείται καθόλη τη διάρκεια της κίνησης του σωματιδίου. Η μικρή απόκλιση οφείλεται στο αριθμητικό σφάλμα των υπολογισμών στο observables .f90, ενώ οι μικρές διακυμάνσεις στα αριθμητικά σφάλματα της μεθόδου ολοκλήρωσης. Το γινόμενο $\Delta x(t)\Delta p(t)$ ταλαντώνεται και η τιμή του μένει φραγμένη ανάμεσα στη μέγιστη και ελάχιστη τιμή που παίρνει στο χρόνο.

1.8 Παράρτημα

1.8.1 Απόδειξη Σχέσης (1.40)

Αναπτύσσουμε τη συνάρτηση $R(x, t)$ κατά Taylor γύρω από το t

$$\begin{aligned} R\left(x, t + \frac{\Delta t}{2}\right) &= R(x, t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial R(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{2!} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 R(x, t)}{\partial t^2} + \mathcal{O}(\Delta t^3) \\ R\left(x, t - \frac{\Delta t}{2}\right) &= R(x, t) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial R(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{2!} \left(\frac{\Delta t}{2}\right)^2 \frac{\partial^2 R(x, t)}{\partial t^2} - \mathcal{O}(\Delta t^3), \end{aligned} \quad (1.58)$$

και αφαιρούμε κατά μέλη:

$$R\left(x, t + \frac{\Delta t}{2}\right) - R\left(x, t - \frac{\Delta t}{2}\right) = \Delta t \frac{\partial R(x, t)}{\partial t} + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (1.59)$$

Αντικαθιστούμε στο δεξί μέλος την δεύτερη εξίσωση από τις (1.33) και παίρνουμε:

$$\begin{aligned} R\left(x, t + \frac{\Delta t}{2}\right) &= R\left(x, t - \frac{\Delta t}{2}\right) + \\ &+ \Delta t \left(-\frac{1}{2} \frac{\partial^2 I(x, t)}{\partial x^2} + V(x)I(x, t) \right) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \end{aligned} \quad (1.60)$$

Στη συνέχεια αναπτύσσουμε τη συνάρτηση $I(x, t)$ κατά Taylor γύρω από το x

$$\begin{aligned} I(x + \Delta x, t) &= I(x, t) + \Delta x \frac{\partial I(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2!} \Delta x^2 \frac{\partial^2 I(x, t)}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^3) \\ I(x - \Delta x, t) &= I(x, t) - \Delta x \frac{\partial I(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2!} \Delta x^2 \frac{\partial^2 I(x, t)}{\partial x^2} - \mathcal{O}(\Delta x^3), \end{aligned} \quad (1.61)$$

και προσθέτουμε κατά μέλη:

$$I(x + \Delta x, t) + I(x - \Delta x, t) = 2I(x, t) + \Delta x^2 \frac{\partial^2 I(x, t)}{\partial x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^4), \quad (1.62)$$

οπότε παίρνουμε

$$\frac{\partial^2 I(x, t)}{\partial x^2} = \frac{1}{\Delta x^2} (I(x + \Delta x, t) - 2I(x, t) + I(x - \Delta x, t)) + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (1.63)$$

Αντικαθιστώντας στην (1.60) παίρνουμε

$$\begin{aligned} R\left(x, t + \frac{\Delta t}{2}\right) &= \\ &= R\left(x, t - \frac{\Delta t}{2}\right) - \frac{\Delta t}{2\Delta x^2} \{I(x + \Delta x, t) - 2I(x, t) + I(x - \Delta x, t)\} \\ &+ \Delta t V(x)I(x, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3) + \mathcal{O}(\Delta x^2 \Delta t). \end{aligned} \quad (1.64)$$

Επιλέγουμε $x_i = x$, $t_n = t - \Delta t/2$, οπότε παίρνουμε $x_{i+1} = x + \Delta x$, $x_{i-1} = x - \Delta x$, $t_{n+1/2} = t$, $t_n = t + \Delta t/2$, $R(x, t + \frac{\Delta t}{2}) = R_i^{n+1}$, $R(x, t - \frac{\Delta t}{2}) = R_i^n$, $I(x, t) = I_i^n$, $I(x + \Delta x, t) = I_{i+1}^n$, $I(x - \Delta x, t) = I_{i-1}^n$, $V(x) = V(x_i) \equiv V_i$ και καταλήγουμε στη σχέση

$$R_i^{n+1} = R_i^n - a(I_{i+1}^n - 2I_i^n + I_{i-1}^n) + \Delta t V_i I_i^n + \mathcal{O}(\Delta t^3) + \mathcal{O}(\Delta x^2 \Delta t), \quad (1.65)$$

όπου $a \equiv \Delta t/(2\Delta x^2)$. Αυτή δεν είναι άλλη από την πρώτη εξίσωση στην (1.40), αν θεωρήσουμε τα σφάλματα αμελητέα. Με τον ίδιο ακριβώς τρόπο αποδεικνύεται και η δεύτερη.

Σύμφωνα με την (1.65), σε κάθε βήμα προστίθεται σφάλμα τάξης $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ και $\mathcal{O}(\Delta x^2 \Delta t)$. Μετά από N_t βήματα, τα σφάλματα θα είναι

$$\sim N_t \times \mathcal{O}(\Delta t^3) \sim \frac{t_{\max}}{\Delta t} \times \mathcal{O}(\Delta t^3) \sim \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad (1.66)$$

από τον πρώτο όρο, και

$$\sim N_t \times \mathcal{O}(\Delta x^2 \Delta t) \sim \frac{t_{\max}}{\Delta t} \times \mathcal{O}(\Delta x^2 \Delta t) \sim \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (1.67)$$

από τον δεύτερο. Αν κρατήσουμε το Δx σταθερό, θεωρώντας το $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ αμελητέο, τότε η μέθοδος δίνει σφάλμα τάξης Δt^2 , οπότε θεωρείται δεύτερης τάξης ως προς Δt .

Στην πράξη, όμως, θέλουμε να κρατήσουμε το Δt όσο γίνεται μεγαλύτερο και να μειώσουμε το συνολικό σφάλμα. Για Δx αρκετά μικρό, $(2/\Delta x)^2 \gg V_+$ και $V_+ + (2/\Delta x)^2 \approx 2/\Delta x^2$, οπότε η σχέση ευστάθειας (1.46), γίνεται

$$a = \frac{\Delta t}{2(\Delta x)^2} \leq \frac{1}{2}. \quad (1.68)$$

Μειώνοντας το Δt μαζί με το Δx , κρατώντας το a σταθερό και κοντά στο 1, έχουμε $\Delta x^2 \sim \Delta t/(2a)$, οπότε το σφάλμα από τον όρο (1.67) γίνεται $\mathcal{O}(\Delta x^2) \sim \mathcal{O}(\Delta t)$ και επικρατεί από αυτό του όρου (1.66) και το συνολικό σφάλμα από την (1.40) γίνεται $\mathcal{O}(\Delta t)$.

1.8.2 Απόδειξη Σχέσης (1.48)

Η πυκνότητα πιθανότητας εύρεσης του σωματιδίου στη θέση x δίνεται από τη σχέση

$$\rho(x, t) = \psi(x, t)^* \psi(x, t) = R(x, t)^2 + I(x, t)^2. \quad (1.69)$$

Η σχέση αυτή δεν μπορεί να χρησιμοποιηθεί με τον δυναμικό κανόνα (1.40), γιατί τα $R(x, t)$ και $I(x, t)$ ορίζονται σε διαφορετικές χρονικές στιγμές. Οπότε

για τις χρονικές στιγμές $t = n\Delta t$ ορίζουμε την ποσότητα:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}(x, t) &= R(x, t)^2 + I(x, t + \frac{\Delta t}{2})I(x, t - \frac{\Delta t}{2}) \\ \hat{\rho}(x, t + \frac{\Delta t}{2}) &= R(x, t)R(x, t + \Delta t) + I(x, t + \frac{\Delta t}{2})^2.\end{aligned}\quad (1.70)$$

Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις (1.58) για τη συνάρτηση $I(x, t \pm \frac{\Delta t}{2})$, παίρνουμε

$$\begin{aligned}I(x, t + \frac{\Delta t}{2})I(x, t - \frac{\Delta t}{2}) &= \\ &= \left(I(x, t) + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial I(x, t)}{\partial t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right) \left(I(x, t) - \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial I(x, t)}{\partial t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) \right) = \\ &= I(x, t)^2 + \frac{\Delta t}{2} \left(-I(x, t) \frac{\partial I(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial I(x, t)}{\partial t} I(x, t) \right) + \mathcal{O}(\Delta t^2) = \\ &= I(x, t)^2 + \mathcal{O}(\Delta t^2),\end{aligned}\quad (1.71)$$

άρα

$$\hat{\rho}(x, t) = R(x, t)^2 + I(x, t)^2 + \mathcal{O}(\Delta t^2) = \rho(x, t) + \mathcal{O}(\Delta t^2).\quad (1.72)$$

Πρέπει να τονιστεί ότι το σφάλμα $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ της παραπάνω σχέσης δεν συσσωρεύεται με τον χρόνο, αφού σε κάθε βήμα ο υπολογισμός γίνεται με τις νέες τιμές των $R(x, t)^2$ και $I(x, t)^2$. Στο σφάλμα του υπολογισμού της $\rho(x, t)$ πρέπει κανείς να προσθέσει τα σφάλματα των $R(x, t)^2$ και $I(x, t)^2$. Με παρόμοιο τρόπο μπορεί κανείς να δείξει ότι

$$\hat{\rho}(x, t + \frac{\Delta t}{2}) = R(x, t + \frac{\Delta t}{2})^2 + I(x, t + \frac{\Delta t}{2})^2 + \mathcal{O}(\Delta t^2).\quad (1.73)$$

Ορίζουμε

$$\begin{aligned}\rho_i^n &= \hat{\rho}(x_i, t_n) \\ &= R(x_i, t_n)^2 + I(x_i, t_n + \frac{\Delta t}{2})I(x_i, t_n - \frac{\Delta t}{2}) \\ &= (R_i^n)^2 + I_i^n I_i^{n-1} \\ \rho_i^{n+\frac{1}{2}} &= \hat{\rho}(x_i, t_n + \frac{\Delta t}{2}) \\ &= R(x_i, t_n)R(x_i, t_n + \Delta t) + I(x_i, t_n + \frac{\Delta t}{2})^2 \\ &= R_i^n R_i^{n+1} + (I_i^n)^2.\end{aligned}\quad (1.74)$$

Η συνολική πιθανότητα P^n και $P^{n+\frac{1}{2}}$ που δίνεται από τις εξισώσεις (1.48) στο σχήμα Visscher διατηρείται. Πράγματι, λαμβάνοντας υπόψη τις συνοριακές συνθήκες

$$R_1^n = R_{N_x}^n = I_1^n = I_{N_x}^n = 0, \quad (1.75)$$

έχουμε ότι

$$\begin{aligned} P^n &= \sum_{i=2}^{N_x-1} \rho_i^n = \sum_{i=2}^{N_x-1} [(R_i^n)^2 + I_i^n I_i^{n-1}] \\ P^{n+\frac{1}{2}} &= \sum_{i=2}^{N_x-1} \rho_i^{n+\frac{1}{2}} = \sum_{i=2}^{N_x-1} [(I_i^n)^2 + R_i^n R_i^{n+1}], \end{aligned} \quad (1.76)$$

οπότε

$$\begin{aligned} \rho_i^{n+\frac{1}{2}} - \rho_i^n &= R_i^n (R_i^{n+1} - R_i^n) + I_i^n (I_i^n - I_i^{n-1}) \\ &= R_i^n [-a(I_{i+1}^n - 2I_i^n + I_{i-1}^n)] + \Delta t V_i R_i^n I_i^n \\ &\quad + I_i^n [a(R_{i+1}^n - 2R_i^n + R_{i-1}^n)] - \Delta t V_i I_i^n R_i^n \\ &= -aR_i^n I_{i+1}^n - aR_i^n I_{i-1}^n \\ &\quad + aI_i^n R_{i+1}^n + aI_i^n R_{i-1}^n. \end{aligned} \quad (1.77)$$

Στη δεύτερη σειρά χρησιμοποιήσαμε τις εξισώσεις του σχήματος Visscher (1.40). Αθροίζοντας ως προς i παίρνουμε

$$\begin{aligned} \sum_{i=2}^{N_x-1} (\rho_i^{n+\frac{1}{2}} - \rho_i^n) &= -a \sum_{i=2}^{N_x-1} R_i^n I_{i+1}^n - a \sum_{i=2}^{N_x-1} R_i^n I_{i-1}^n \\ &\quad + a \sum_{i=2}^{N_x-1} I_i^n R_{i+1}^n + a \sum_{i=2}^{N_x-1} I_i^n R_{i-1}^n \\ &= -a \sum_{i=3}^{N_x} R_{i-1}^n I_i^n - a \sum_{i=2}^{N_x-1} R_i^n I_{i-1}^n \\ &\quad + a \sum_{i=3}^{N_x} I_{i-1}^n R_i^n + a \sum_{i=2}^{N_x-1} I_i^n R_{i-1}^n \\ &= -aR_{N_x-1}^n I_{N_x}^n - aR_2^n I_1^n \\ &\quad + aI_{N_x-1}^n R_{N_x}^n + aI_2^n R_1^n \\ &= 0, \end{aligned} \quad (1.78)$$

όπου στην τελευταία γραμμή χρησιμοποιήσαμε τις συνοριακές συνθήκες (1.75). Άρα

$$P^{n+\frac{1}{2}} - P^n = 0 \Rightarrow P^{n+\frac{1}{2}} = P^n = P^{n-\frac{1}{2}} = P^{n-1} = \dots = P^1, \quad (1.79)$$

και οι ποσότητες αυτές διατηρούνται ακριβώς.

1.8.3 Αναμενόμενες Τιμές

Για να υπολογίσουμε τις αναμενόμενες τιμές συναρτήσεως του χρόνου (1.50), (1.54), (1.56), (1.57), μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε το θεώρημα του Ehrenfest:

$$i \frac{d}{dt} \langle \mathcal{A}(x, p) \rangle(t) = \langle [\mathcal{A}(x, p), H] \rangle, \quad (1.80)$$

όπου $\mathcal{A}(x, p)$ είναι ένας ερμιτιανός τελεστής που δεν έχει ρητή εξάρτηση από τον χρόνο, H είναι ο τελεστής της Χαμιλτονιανής και $[\mathcal{A}(x, p), H] = \mathcal{A}(x, p)H - H\mathcal{A}(x, p)$ είναι ο μεταθέτης δύο τελεστών. Παρατηρήστε πως η παραπάνω εξίσωση είναι φορμαλιστικά όμοια με αυτή που προκύπτει από την εξίσωση κίνησης της κλασικής μηχανικής

$$\frac{d}{dt} \mathcal{A}(x, p) = \{\mathcal{A}(x, p), H\}$$

για την κλασική ποσότητα $\mathcal{A}(x, p)$, με την αντικατάσταση $(1/i)[\cdot, \cdot] \rightarrow \{\cdot, \cdot\}$, όπου $\{\mathcal{A}(x, p), H\}$ είναι η αγγύλη Poisson¹⁴ των $\mathcal{A}(x, p)$, H .

Η απόδειξη του θεωρήματος είναι εύκολη. Έστω ότι το σωματίο βρίσκεται στην κατάσταση $\psi(x, t)$, οπότε:

$$\langle \mathcal{A}(x, p) \rangle(t) = \int \psi(x, t)^* \mathcal{A}(x, p) \psi(x, t) dx. \quad (1.81)$$

Παρατηρήστε πως η χρονική εξάρτηση της $\langle \mathcal{A}(x, p) \rangle(t)$ προκύπτει από τη χρονική εξάρτηση της $\psi(x, t)$, η οποία δίνεται από την εξίσωση του Schrödinger

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H \psi(x, t). \quad (1.82)$$

¹⁴ $\{\mathcal{A}, H\} = (\partial \mathcal{A} / \partial x)(\partial H / \partial p) - (\partial H / \partial x)(\partial \mathcal{A} / \partial p)$

Τότε

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle \mathcal{A}(x, p) \rangle(t) &= \\
&= \int \frac{\partial \psi(x, t)^*}{\partial t} \mathcal{A}(x, p) \psi(x, t) dx + \int \psi(x, t)^* \mathcal{A}(x, p) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} dx \\
&= \int \left(\frac{1}{i} H \psi(x, t)\right)^* \mathcal{A}(x, p) \psi(x, t) dx + \int \psi(x, t)^* \mathcal{A}(x, p) \left(\frac{1}{i} H \psi(x, t)\right) dx \\
&= \int \left(-\frac{1}{i}\right) \psi(x, t)^* H^\dagger \mathcal{A}(x, p) \psi(x, t) dx + \int \psi(x, t)^* \mathcal{A}(x, p) H \left(\frac{1}{i}\right) \psi(x, t) dx \\
&= -\frac{1}{i} \int \psi(x, t)^* H \mathcal{A}(x, p) \psi(x, t) dx + \frac{1}{i} \int \psi(x, t)^* \mathcal{A}(x, p) H \psi(x, t) dx \\
&= \frac{1}{i} \int \psi(x, t)^* (\mathcal{A}(x, p) H - H \mathcal{A}(x, p)) \psi(x, t) dx \\
&= \frac{1}{i} \int \psi(x, t)^* [\mathcal{A}(x, p), H] \psi(x, t) dx \\
&= \frac{1}{i} \langle [\mathcal{A}(x, p), H] \rangle,
\end{aligned}$$

οπότε παίρνουμε την (1.81). Στην 3η γραμμή χρησιμοποιήσαμε τον ορισμό του Ερμιτιανού συζυγούς¹⁵ H^\dagger της Χαμιλτονιανής και στην 4η το γεγονός ότι η Χαμιλτονιανή είναι ένας Ερμιτιανός τελεστής, δηλαδή $H = H^\dagger$.

Στους παρακάτω υπολογισμούς θα χρειαστούμε τη βασική σχέση τελεστών ορμής-θέσης

$$[x, p] = i, \quad (1.83)$$

και τις αλγεβρικές σχέσεις μεταξύ οποιωνδήποτε τελεστών

$$\begin{aligned}
[\mathcal{A}, \mathcal{B}] &= -[\mathcal{B}, \mathcal{A}], \\
[\lambda \mathcal{A} + \mu \mathcal{B}, \mathcal{C}] &= \lambda [\mathcal{A}, \mathcal{C}] + \mu [\mathcal{B}, \mathcal{C}], \\
[\mathcal{A}\mathcal{B}, \mathcal{C}] &= \mathcal{A}[\mathcal{B}, \mathcal{C}] + [\mathcal{A}, \mathcal{C}]\mathcal{B},
\end{aligned} \quad (1.84)$$

οι οποίες αποδεικνύονται απλά με ανάπτυγμα και των δύο πλευρών των εξισώσεων.

Επίσης θα χρειαστούμε την αρχική τιμή των αναμενόμενων τιμών των παρακάτω τελεστών, όταν το σωματίδιο βρίσκεται στην αρχική κατάσταση $\psi(x, 0)$ που δίνεται από την (1.25). Αυτές δίνονται από τις (1.27), (1.28), τις οποίες πα-

¹⁵Ο Ερμιτιανός τελεστής \mathcal{A}^\dagger του τελεστή \mathcal{A} ορίζεται από τη σχέση $\langle \psi | \mathcal{A} | \phi \rangle = (\langle \phi | \mathcal{A}^\dagger | \psi \rangle)^*$
 $\Leftrightarrow \int \psi^* \mathcal{A} \phi dx = (\int \phi^* \mathcal{A}^\dagger \psi dx)^* = \int \phi (\mathcal{A}^\dagger \psi)^* dx = \int (\mathcal{A}^\dagger \psi)^* \phi dx$. Προφανώς $(\mathcal{A}^\dagger)^\dagger = \mathcal{A}$.

ραθέτουμε παρακάτω:

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle(0) &= x_0, & \langle p \rangle(0) &= k_0, \\
 \langle x^2 \rangle(0) &= x_0^2 + \sigma^2, & \langle p^2 \rangle(0) &= k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2}, \\
 \langle xp \rangle(0) &= k_0 x_0 + \frac{i}{2}, & \langle px \rangle(0) &= k_0 x_0 - \frac{i}{2}, \\
 \Delta x(0) &= \sigma, & \Delta p(0) &= \frac{1}{2\sigma},
 \end{aligned} \tag{1.85}$$

οι οποίες αποδεικνύονται εύκολα κάνοντας τα ολοκληρώματα (1.11) με την $\psi(x, 0)$.

Έστω ένα ελεύθερο σωματίο με Χαμιλτονιανή

$$H = \frac{1}{2}p^2, \tag{1.86}$$

οπότε παίρνουμε

$$\begin{aligned}
 [x, H] &= [x, \frac{p^2}{2}] = \frac{p}{2}[x, p] + [x, p]\frac{p}{2} = \frac{p}{2}i + i\frac{p}{2} = ip, \\
 [p, H] &= [p, \frac{p^2}{2}] = \frac{p}{2}[p, p] + [p, p]\frac{p}{2} = 0, \\
 [x^2, H] &= x[x, H] + [x, H]x = i(xp + px), \\
 [p^2, H] &= p[p, H] + [p, H]p = 0 + 0 = 0, \\
 [xp, H] &= x[p, H] + [x, H]p = x0 + (ip)p = ip^2, \\
 [px, H] &= [xp - i, H] = [xp, H] = ip^2.
 \end{aligned} \tag{1.87}$$

Εφαρμόζουμε την εξίσωση (1.80) για

$$i \frac{d}{dt} \langle p \rangle(t) = \langle [p, H] \rangle = 0 \Rightarrow \langle p \rangle(t) = \langle p \rangle(0) = k_0, \tag{1.88}$$

$$i \frac{d}{dt} \langle p^2 \rangle(t) = \langle [p^2, H] \rangle = 0 \Rightarrow \langle p^2 \rangle(t) = \langle p^2 \rangle(0) = k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2}, \tag{1.89}$$

$$(\Delta p(t))^2 = (\Delta p(0))^2 = \langle p^2 \rangle(0) - (\langle p \rangle(0))^2 = \frac{1}{4\sigma^2}. \tag{1.90}$$

και για

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} \langle x \rangle(t) &= \langle [x, H] \rangle = i \langle p \rangle(t) = i \langle p \rangle(0) = ik_0 \Rightarrow \\
 \langle x \rangle(t) &= k_0 t + \langle x \rangle(0) = k_0 t + x_0,
 \end{aligned} \tag{1.91}$$

$$\begin{aligned}
i \frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle(t) &= \langle [x^2, H] \rangle = i \langle xp + px \rangle, \\
i \frac{d}{dt} \langle xp \rangle(t) &= \langle [xp, H] \rangle = i \langle p^2 \rangle = i \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) \Rightarrow \\
\langle xp \rangle(t) &= \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) t + \langle xp \rangle(0) = \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) t + k_0 x_0 + \frac{i}{2} \\
\langle px \rangle(t) &= \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) t + \langle px \rangle(0) = \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) t + k_0 x_0 - \frac{i}{2}
\end{aligned}$$

Αντικαθιστώντας τις δύο τελευταίες σχέσεις στην πρώτη, παίρνουμε

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \langle x^2 \rangle(t) &= \langle xp \rangle + \langle px \rangle = 2 \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) t + 2k_0 x_0 \Rightarrow \\
\langle x^2 \rangle(t) &= \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) t^2 + 2k_0 x_0 t + \langle x^2 \rangle(0) \\
&= \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) t^2 + 2k_0 x_0 t + x_0^2 + \sigma^2. \tag{1.92}
\end{aligned}$$

Η αβεβαιότητα Δx υπολογίζεται από τις σχέσεις

$$\begin{aligned}
(\Delta x(t))^2 &= \langle x^2 \rangle(t) - (\langle x \rangle(t))^2 \\
&= \left\{ \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) t^2 + 2k_0 x_0 t + x_0^2 + \sigma^2 \right\} - (k_0 t + x_0)^2 \\
&= \frac{1}{4\sigma^2} t^2 + \sigma^2. \tag{1.93}
\end{aligned}$$

Στη συνέχεια θεωρούμε τον απλό αρμονικό ταλαντωτή

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}x^2. \tag{1.94}$$

Για απλότητα, θα θεωρήσουμε το αρχικό κυματοπακέτο να έχει το κέντρο του στην αρχή των αξόνων, δηλ. $x_0 = 0$. Από τις σχέσεις

$$\begin{aligned}
[x, H] &= [x, \frac{1}{2}p^2] = ip, \\
[p, H] &= [p, \frac{1}{2}x^2] = \frac{1}{2}x[p, x] + \frac{1}{2}[p, x]x = \frac{1}{2}x(-i) + \frac{1}{2}(-i)x = -ix,
\end{aligned}$$

παίρνουμε

$$\begin{aligned}
i \frac{d}{dt} \langle x \rangle(t) &= \langle [x, H] \rangle = +i \langle p \rangle \Rightarrow \frac{d^2}{dt^2} \langle x \rangle(t) = + \frac{d}{dt} \langle p \rangle, \\
i \frac{d}{dt} \langle p \rangle(t) &= \langle [p, H] \rangle = -i \langle x \rangle \Rightarrow \frac{d^2}{dt^2} \langle p \rangle(t) = - \frac{d}{dt} \langle x \rangle,
\end{aligned} \tag{1.95}$$

οπότε

$$\begin{aligned}\frac{d^2}{dt^2}\langle x \rangle(t) &= -\langle x \rangle \Rightarrow \frac{d^2}{dt^2}\langle x \rangle(t) + \langle x \rangle = 0, \\ \frac{d^2}{dt^2}\langle p \rangle(t) &= -\langle p \rangle \Rightarrow \frac{d^2}{dt^2}\langle p \rangle(t) + \langle p \rangle = 0.\end{aligned}$$

Οι παραπάνω εξισώσεις δίνουν αρμονική ταλάντωση των μεγεθών και, λαμβάνοντας υπόψη τις αρχικές συνθήκες $\langle x \rangle(0) = 0$, $\langle p \rangle(0) = k_0$ και την (1.95), παίρνουμε

$$\begin{aligned}\langle x \rangle(t) &= k_0 \sin t, \\ \langle p \rangle(t) &= k_0 \cos t.\end{aligned}\tag{1.96}$$

Για να υπολογίσουμε τις αναμενόμενες τιμές των x^2 , p^2 , H , είναι βολικό να θεωρήσουμε τους τελεστές δημιουργίας και καταστροφής, a^\dagger και a αντίστοιχα:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x + ip), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(x - ip) \Leftrightarrow\tag{1.97}$$

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a), \quad p = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a).\tag{1.98}$$

από όπου προκύπτει η θεμελιώδης σχέση:

$$\begin{aligned}[a, a^\dagger] &= \left[\frac{x + ip}{\sqrt{2}}, \frac{x - ip}{\sqrt{2}} \right] = \frac{1}{2}(-i[x, p] + i[p, x]) = \frac{1}{2}(-ii + i(-i)) \\ &= 1.\end{aligned}\tag{1.99}$$

Ισχύουν οι σχέσεις:

$$\begin{aligned}H &= \frac{1}{2} \left(\frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \right)^2 \\ &= \frac{1}{2} (aa^\dagger + a^\dagger a) \\ &= a^\dagger a + \frac{1}{2} \\ &= aa^\dagger - \frac{1}{2},\end{aligned}\tag{1.100}$$

$$x^2 = \frac{1}{2} (+a^\dagger a^\dagger + aa^\dagger + a^\dagger a + aa),\tag{1.101}$$

$$p^2 = \frac{1}{2} (-a^\dagger a^\dagger + aa^\dagger + a^\dagger a - aa),\tag{1.102}$$

καθώς και οι

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad (1.103)$$

$$[a, H] = [a, a^\dagger a + \frac{1}{2}] = [a, a^\dagger]a = a, \quad (1.104)$$

$$[a^\dagger, H] = [a^\dagger, a^\dagger a + \frac{1}{2}] = a^\dagger[a^\dagger, a] = a^\dagger(-1) = -a^\dagger, \quad (1.105)$$

$$[a^2, H] = [a^2, a^\dagger a + \frac{1}{2}] = [a, a^\dagger a]a + a[a, a^\dagger a] = 2a^2, \quad (1.106)$$

$$[(a^\dagger)^2, H] = [(a^\dagger)^2, a^\dagger a + \frac{1}{2}] = [a^\dagger, a^\dagger a]a^\dagger + a^\dagger[a, a^\dagger a] = -2(a^\dagger)^2. \quad (1.107)$$

Οπότε παίρνουμε

$$i \frac{d}{dt} \langle a \rangle(t) = \langle [a, H] \rangle = \langle a \rangle \Rightarrow \langle a \rangle(t) = \langle a \rangle(0) e^{-it} = \frac{i}{\sqrt{2}} k_0 e^{-it},$$

$$\langle a^\dagger \rangle(t) = (\langle a \rangle(t))^* = -\frac{i}{\sqrt{2}} k_0 e^{it},$$

αφού $\langle a \rangle(0) = (\langle x \rangle(0) + i\langle p \rangle(0))/\sqrt{2} = (0 + ik_0)/\sqrt{2}$.

$$i \frac{d}{dt} \langle a^2 \rangle(t) = \langle [a^2, H] \rangle = 2\langle a^2 \rangle \Rightarrow \langle a^2 \rangle(t) = \langle a^2 \rangle(0) e^{-i2t},$$

$$\langle (a^\dagger)^2 \rangle(t) = (\langle a^2 \rangle(t))^* = (\langle a^2 \rangle(0))^* e^{i2t}.$$

Αλλά

$$\begin{aligned} \langle a^2 \rangle(0) &= \left\langle \left(\frac{x + ip}{\sqrt{2}} \right)^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle x^2 \rangle(0) - \frac{1}{2} \langle p^2 \rangle(0) + \frac{i}{2} (\langle xp \rangle + \langle px \rangle) \\ &= \frac{1}{2} \sigma^2 - \frac{1}{2} \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) + \frac{i}{2} \left(\frac{i}{2} - \frac{i}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \sigma^2 - \frac{1}{2} k_0^2 - \frac{1}{8\sigma^2}. \end{aligned}$$

Οπότε τελικά:

$$\langle a^2 \rangle(t) = \left(\frac{1}{2} \sigma^2 - \frac{1}{2} k_0^2 - \frac{1}{8\sigma^2} \right) e^{-i2t}, \quad (1.108)$$

$$\langle (a^\dagger)^2 \rangle(t) = \left(\frac{1}{2} \sigma^2 - \frac{1}{2} k_0^2 - \frac{1}{8\sigma^2} \right) e^{+i2t}. \quad (1.109)$$

Παρομοίως:

$$i \frac{d}{dt} \langle a^\dagger a \rangle(t) = \langle [a^\dagger a, H] \rangle = \langle H - \frac{1}{2}, H \rangle = 0 \Rightarrow \langle a^\dagger a \rangle(t) = \langle a^\dagger a \rangle(0).$$

Αλλά

$$\begin{aligned} \langle a^\dagger a \rangle(0) &= \left\langle \frac{1}{2}x^2 + \frac{1}{2}p^2 - \frac{1}{2} \right\rangle(0), \\ &= \frac{1}{2}\sigma^2 + \frac{1}{2} \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) - \frac{1}{2}, \end{aligned}$$

οπότε λαμβάνοντας υπόψη ότι $aa^\dagger = a^\dagger a + 1$ και $H = a^\dagger a + 1/2$, παίρνουμε

$$\begin{aligned} \langle a^\dagger a \rangle(t) &= \frac{1}{2}\sigma^2 + \frac{1}{2} \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) - \frac{1}{2}, \\ \langle aa^\dagger \rangle(t) &= \frac{1}{2}\sigma^2 + \frac{1}{2} \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) + \frac{1}{2}, \\ \langle H \rangle(t) &= \frac{1}{2}\sigma^2 + \frac{1}{2} \left(k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right). \end{aligned} \quad (1.110)$$

Επίσης

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle(t) &= \frac{1}{2} (\langle a^\dagger a^\dagger \rangle(t) + \langle a^\dagger a \rangle(t) + \langle aa^\dagger \rangle(t) + \langle aa \rangle(t)) \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \left(\frac{1}{2}\sigma^2 - \frac{1}{2}k_0^2 - \frac{1}{8\sigma^2} \right) (e^{+i2t} + e^{-i2t}) + \sigma^2 + k_0^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right\} \\ &= \left(\frac{1}{2}\sigma^2 - \frac{1}{2}k_0^2 - \frac{1}{8\sigma^2} \right) \cos 2t + \frac{1}{2}\sigma^2 + \frac{1}{2}k_0^2 + \frac{1}{8\sigma^2}. \end{aligned} \quad (1.111)$$

Παρομοίως

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle(t) &= \frac{1}{2} (-\langle a^\dagger a^\dagger \rangle(t) + \langle a^\dagger a \rangle(t) + \langle aa^\dagger \rangle(t) - \langle aa \rangle(t)) \\ &= - \left(\frac{1}{2}\sigma^2 - \frac{1}{2}k_0^2 - \frac{1}{8\sigma^2} \right) \cos 2t + \frac{1}{2}\sigma^2 + \frac{1}{2}k_0^2 + \frac{1}{8\sigma^2}. \end{aligned} \quad (1.112)$$

Τέλος

$$\begin{aligned} (\Delta x(t))^2 &= \langle x^2 \rangle(t) - (\langle x \rangle(t))^2 = +\frac{1}{2} \left(\sigma^2 - \frac{1}{4\sigma^2} \right) \cos 2t + \frac{1}{2} \left(\sigma^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right), \\ (\Delta p(t))^2 &= \langle p^2 \rangle(t) - (\langle p \rangle(t))^2 = -\frac{1}{2} \left(\sigma^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right) \cos 2t + \frac{1}{2} \left(\sigma^2 + \frac{1}{4\sigma^2} \right). \end{aligned} \quad (1.113)$$

Αφήνουμε σαν άσκηση να αποδείξετε ότι

$$\begin{aligned}\langle xp \rangle(t) &= -\frac{1}{2} \left(\sigma^2 - k_0^2 - \frac{1}{4\sigma^2} \right) \sin 2t + \frac{i}{2}, \\ \langle px \rangle(t) &= -\frac{1}{2} \left(\sigma^2 - k_0^2 - \frac{1}{4\sigma^2} \right) \sin 2t - \frac{i}{2},\end{aligned}\tag{1.114}$$

άρα

$$\langle xp \rangle(t) + \langle px \rangle(t) = - \left(\sigma^2 - k_0^2 - \frac{1}{4\sigma^2} \right) \sin 2t\tag{1.115}$$

1.9 Ασκήσεις

- 1.1 Να αποδείξετε ότι η κυματοσυνάρτηση (1.25) είναι σωστά κανονικοποιημένη και στη συνέχεια να αποδείξετε τις σχέσεις (1.27) και (1.28).
- 1.2 Να αποδείξετε την εξίσωση (1.73)
- 1.3 Η σχέση (1.35) υπολογίζει την κυματοσυνάρτηση με σφάλμα $\mathcal{O}(\Delta t)$. Ένας πιο ακριβής ορισμός θα ήταν:

$$\begin{aligned}\psi(x_i, t_n) &= R(x_i, t_n) + \frac{i}{2} \{I(x_i, t_{n+\frac{1}{2}}) + I(x_i, t_{n-\frac{1}{2}})\} \\ \psi(x_i, t_{n+\frac{1}{2}}) &= \frac{1}{2} \{R(x_i, t_{n+1}) + R(x_i, t_n)\} + iI(x_i, t_{n+\frac{1}{2}}).\end{aligned}\quad (1.116)$$

Να αποδείξετε ότι το σφάλμα μειώνεται σε $\mathcal{O}(\Delta t^2)$ και να υλοποιήσετε τον ορισμό της $\psi(x_i, t_n)$ στα προγράμματά σας (αφορά μόνο τα προγράμματα που υπολογίζουν αναμενόμενες τιμές).

- 1.4 Στο πρόγραμμα `tdse_fd.f90`, θέσαμε την παράμετρο `tinypsi = 1.0D-20`. Για να καταλάβετε το ρόλο της, να θέσετε `tinypsi = 1.0D-300` και να τρέξετε το πρόγραμμα για $V(x) = 0$, $x_0 = -7$, $\sigma = 0.5$, $k_0 = 3$, $\Delta x = 0.02$, $a = 0.45$, $x_{\max} = 20$, $t_{\max} = 0.3$. Να κάνετε τη γραφική παράσταση της πυκνότητας πιθανότητας $\rho(x)$ για όλες τις τιμές του χρόνου t . Τι παρατηρείτε; Γιατί; Να θέσετε πάλι `tinypsi = 1.0D-20` και να επαναλάβετε. Τι παρατηρείτε;
- 1.5 Το ελεύθερο σωματίο, το οποίο αρχικά βρίσκεται στην κατάσταση $\psi(x, 0) = (2/\pi)^{1/4} \exp(-x^2 + ik_0x)$, τη χρονική στιγμή t βρίσκεται στην κατάσταση

$$\psi(x, t) = \frac{(2/\pi)^{1/4}}{\sqrt{1+2it}} \exp\left(-\frac{1}{4}k_0^2\right) \exp\left\{-\frac{1}{1+2it}\left(x - \frac{ik_0}{2}\right)^2\right\}, \quad (1.117)$$

με

$$\rho(x, t) = |\psi(x, t)|^2 = \frac{(2/\pi)^{1/2}}{\sqrt{1+4t^2}} \exp\left\{-\frac{2(x - k_0t)^2}{1+4t^2}\right\}. \quad (1.118)$$

Να αποδείξετε ότι η (1.117) είναι λύση της εξίσωσης Schrödinger και στη συνέχεια να συγκρίνετε τα αποτελέσματα του προγράμματος `tdse_fd.f90` με τις παραπάνω σχέσεις, επιλέγοντας $k_0 = 3$, $x_{\max} = 40$.

- 1.6 Μελετήστε το δυναμικό της εξίσωσης (1.51) για $V_0 = 1, 2, 3, 4, 6, 8, 10, 12, 16, b = 0.5$. Να θέσετε $k_0 = 3, \sigma = 0.5, \Delta x = 0.02, x_{\max} = 30, t_{\max} = 15$. Να υπολογίσετε τις πιθανότητες $p_R(t) = \int_{-x_{\max}}^0 \rho(x, t) dx, p_T(t) = \int_0^{+x_{\max}} \rho(x, t) dx$ και από αυτές τις $p_{R,\infty} = p_R(+\infty), p_{T,\infty} = p_T(+\infty)$. Να κάνετε τη γραφική παράσταση των $p_{R,\infty}, p_{T,\infty}$ συναρτήσεων του V_0 και να συζητήσετε τα αποτελέσματά σας.
- 1.7 Μελετήστε το δυναμικό της εξίσωσης (1.51) για $V_0 = 12, b = 0.01, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.10, 0.12, 0.14, 0.16, 0.18, 0.20, 0.30, 0.40, 0.50$. Να θέσετε $k_0 = 3, \sigma = 0.5, \Delta x = 0.02, x_{\max} = 30, t_{\max} = 15$. Να υπολογίσετε τις πιθανότητες $p_R(t) = \int_{-x_{\max}}^0 \rho(x, t) dx, p_T(t) = \int_0^{+x_{\max}} \rho(x, t) dx$ και από αυτές τις $p_{R,\infty} = p_R(+\infty), p_{T,\infty} = p_T(+\infty)$. Να κάνετε τη γραφική παράσταση των $p_{R,\infty}, p_{T,\infty}$ συναρτήσεων του b και να συζητήσετε τα αποτελέσματά σας.
- 1.8 Να αναπαράξετε το Σχήμα 1.9 για $k_0 = 3, 6, 9, 12$ και να συγκρίνετε τις τιμές τους με το θεωρητικό αποτέλεσμα (1.54) κάνοντας τις γραφικές παραστάσεις $(t_i, \langle x \rangle(t_i) - \langle x \rangle_{\text{theory}}(t_i)), (t_i, \Delta x(t_i) - \Delta x_{\text{theory}}(t_i))$, όπου οι τιμές $\langle x \rangle_{\text{theory}}(t), \Delta x_{\text{theory}}(t)$ θα υπολογίζονται από τις σχέσεις (1.54).
- 1.9 Να αναπαράξετε τα Σχήματα 1.12 και 1.13 παίρνοντας $x_0 = 0, k_0 = 3, \sigma = 0.5, \Delta x = 0.02, a = 0.45, x_{\max} = 12$. Στη συνέχεια να κάνετε τις γραφικές παραστάσεις των $(t_i, \langle x \rangle(t_i) - \langle x \rangle_{\text{theory}}(t_i)), (t_i, \langle x^2 \rangle(t_i) - \langle x^2 \rangle_{\text{theory}}(t_i)), (t_i, \langle p \rangle(t_i) - \langle p \rangle_{\text{theory}}(t_i)), (t_i, \langle p^2 \rangle(t_i) - \langle p^2 \rangle_{\text{theory}}(t_i)), (t_i, \Delta x(t_i) - \Delta x_{\text{theory}}(t_i)), (t_i, \Delta p(t_i) - \Delta p_{\text{theory}}(t_i))$, όπου οι θεωρητικές τιμές θα υπολογίζονται από τις σχέσεις (1.57). Να επαναλάβετε για $k_0 = 6, 12$ επιλέγοντας κατάλληλη τιμή για το x_{\max} , έτσι ώστε η $\psi(x, t)$ να είναι αμελητέα στη γειτονιά των $x = \pm x_{\max}$.
- 1.10 Coherent states: Παρατηρήστε πως όταν $\sigma = 1/\sqrt{2}$ η σχέση (1.57) προβλέπει πως η διασπορά $\Delta x(t)$ του κυματοπακέτου γίνεται ελάχιστη και ανεξάρτητη του χρόνου. Το τελευταίο σημαίνει πως το σχήμα της $\rho(x, t)$ δεν παραμορφώνεται με τον χρόνο. Το σωματίο αυτό βρίσκεται σε μια κατάσταση η οποία μπορεί να θεωρηθεί πως είναι η “κοντινότερη” σε αυτή ενός κλασικού αρμονικού ταλαντωτή: Μία coherent state ακολουθεί την κλασική τροχιά του σωματιδίου όσο γίνεται κοντύτερα.
- (α') Να επαναλάβετε την προηγούμενη άσκηση για $x_0 = 0, k_0 = 3, \sigma = 1/\sqrt{2}, \Delta x = 0.02, a = 0.45, x_{\max} = 12, t_{\max} = 30$. Πόσο είναι το αριθμητικό σφάλμα στη $\Delta x(t)$;
- (β') Να επαναλάβετε το προηγούμενο ερώτημα για $\Delta x = 0.01$

- (γ') Σε κάθε μια από τις προηγούμενες περιπτώσεις, να κάνετε τη γραφική παράσταση της $\rho(x, t)$ για χρόνους $t_m \approx mT/8$.
- (δ') Να επαναλάβετε τα παραπάνω για $k_0 = 6$, $x_{\max} = 15$.
- (ε') Να διαβάσετε για τις coherent states στη Wikipedia https://en.wikipedia.org/wiki/Coherent_states και να εμβαθύνετε περισσότερο τη μελέτη σας πάνω σε αυτές. Να επιβεβαιώσετε ότι η $\psi(x, 0)$ που χρησιμοποιήσατε είναι ειδική περίπτωση της γενικότερης μορφής των κυματοσυναρτήσεων $\psi^{(\alpha)}(x, t)$ που αναφέρονται στην παραπάνω ιστοσελίδα και να αντιστοιχίσετε τις παραμέτρους στην $\psi^{(\alpha)}(x, t)$ με αυτές που χρησιμοποιήθηκαν στην $\psi(x, 0)$ (εξίσωση (1.25)).

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[Κεφάλαιο 1]

- [1] P.B. Visscher, “*A fast explicit algorithm for the time-dependent Schrödinger equation*”, *Computers in Physics* 5 (1991) 596.

