

# Równanie Schrödingera zależne od czasu

Tomasz Fał  
t.fas@uw.edu.pl

Podobnie jak równanie przewodnictwa ciepła, łatwo możemy rozpisać równanie Schrödingera do postaci rozwiązywalnej metodą różnic skończonych. Wychodząc ze standardowej definicji:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) \quad \psi(0,t) = \psi(L,t) = 0 \quad (1)$$

gdzie  $V(x)$  to funkcja potencjału, a  $\psi(x,t)$  to szukana funkcja falowa z warunkami brzegowymi zadanymi powyżej, możemy rozpisać do postaci (ignorując po drodze stałe jak  $\hbar$  czy  $m$ ):

$$i\frac{\psi_j^{m+1} - \psi_j^m}{\Delta t} = -\frac{1}{2}\frac{\psi_{j+1}^m - 2\psi_j^m + \psi_{j-1}^m}{\Delta x^2} + V(x)\psi_j^m \quad (2)$$

gdzie  $\Delta t$  oraz  $\Delta x$  to kroki kolejno czasowe i przestrzenne. Indeksy  $m$  oraz  $j$  numerują kolejne kroki czasowe i przestrzenne. Oznacza to, że aktualizacja równania w czasie jest dana wzorem:

$$\psi_j^{m+1} = \psi_j^m + \frac{i}{2}\frac{\Delta t}{\Delta x^2}(\psi_{j+1}^m - 2\psi_j^m + \psi_{j-1}^m) - i\Delta t V(x)\psi_j^m \quad (3)$$

Celem tego projektu jest zaimplementowanie klasy rozwiązującej równanie Schrödingera metodą różnic skończonych. Klasa ta powinna przechowywać informacje o zakresie przestrzennym i czasowym oraz przyjmować funkcję potencjału oraz jej parametry jako atrybuty. Wszystkie parametry tej klasy powinny być ustawiane za pomocą dedykowanych funkcji. Stan początkowy układu, czyli funkcja dla  $t = 0$  jest podawana przez użytkownika. Metoda rozwiązująca równanie powinna zwracać tablicę wartości funkcji falowych dla kolejnych chwil czasu. Otrzymane rozwiązania należy zwizualizować na wykresie, gdzie przedstawione zostaną: kształt potencjału oraz wartość bezwzględna funkcji falowej. dodatkowo można przedstawić części rzeczywiste i urojone na tym samym wykresie. Metoda wizualizacji danych jest dowolna. Można wykorzystać poznaną już bibliotekę ImPlot albo wyeksportować dane do pliku i wyrysować je w np. w Pythonie.

Dodatkowo należy dokonać transformaty Fouriera otrzymanego wyniku oraz przedstawić go na wykresie. Krótko opisać czym jest otrzymany wynik transformaty. Jak wyznaczyć wartości osi X transformaty?

Dodatkowe źródła:

[Source 1](#)

## Warunki oceniania

- Poprawna implementacja klasy rozwiązującej równanie (10 pkt)
- Poprawna implementacja metod klasy (setters/getters) (10 pkt)
- Poprawna implementacja ewolucji czasowej równania (20 pkt)
- Poprawna implementacja wizualizacji równania (10 pkt)
- Poprawna implementacja transformaty Fouriera (10 pkt)

W projekcie mogą zostać przyznane punkty ujemne za np. brak pliku konfiguracyjnego przy dużej ilości plików źródłowych, popełnianie błędów jak doprowadzenie do wycieku pamięci czy też irracjonalnie nieoptymalny kod.

Przykładowy wygląd programu:

