

Московский Государственный Университет
Физический факультет
Кафедра физики частиц и космологии

Потенциал $1/x^2$ и температура чёрной дыры

Курсовая работа
студента 202 группы
Чепчуррова Ивана Ивановича

Научный руководитель:
доктор физ.-мат. наук, профессор
Белокуров Владимир Викторович

Москва, 2023

Содержание

1	Аннотация	3
2	Введение	3
2.1	Связь потенциала α/x^2 с температурой черной дыры	3
2.2	Поиск когерентных состояний	5
2.2.1	Постановка задачи	5
2.2.2	Когерентные состояния	5
2.2.3	Связь с задачей $H = -d_x^2/2 + x^2/2 + g^2x^{-2}$	7
3	Численное решение стационарного уравнения Шредингера	9
3.1	Описание алгоритмов	9
3.2	Применение метода конечных разностей	9
4	Параметр α	11
5	Численное решение нестационарного уравнения Шредингера	12
5.1	Постановка задачи	12
5.2	Описание методов	12
5.2.1	Метод конечных разностей	12
5.2.2	Аппроксимация оператора эволюции схемой Кранка-Николсона	13
5.3	Результаты работы численных методов	14
5.3.1	Результаты методом конечных разностей	14
5.3.2	Результаты методом аппроксимации оператора эволюции	15
6	Сравнение теоретических и численных результатов	19
7	Итоги работы	22
8	Вывод	22
9	Приложение	24

1 Аннотация

В данной работе рассматривается решение одномерного уравнения Шредингера для потенциала α/x^2 и вычисляется квадрат модуля усредненной траектория квазиклассического движения в потенциале α/x^2 через когерентные состояния данной системы.

Как было показано в статье [1] квадрат модуля усредненной траектория квазиклассического движения в потенциале α/x^2 связан с термодинамикой черной дыры. В данной статье путем численного решения нестационарного уравнения Шредингера для данного потенциала, был получен квадрат модуля усредненной траектория квазиклассического движения. Полученный результат сравнивается с результатом статьи [1].

2 Введение

2.1 Связь потенциала α/x^2 с температурой черной дыры

В статье [1] была показана связь квантово-механического уравнения Шрёдингера с потенциалом α/x^2 с термодинамикой черной дыры.

Покажем, что проблема скалярного поля рядом с пространством-временем черной дыры (более точно в любом пространстве времени, где горизонт событий описывается пределом Риндлера (радиальной частью решения Шварцшильда) [6]) может быть сведена к проблеме движения квантово-механической частицы в потенциале α/x^2 , где в данном контексте $|X|^2$ - квадрат модуля усредненной траектории квазиклассического движения в потенциале α/x^2 , который имеет смысл рождения частиц в квантовой теории и $\frac{d|X|^2}{dt}$ - производная квадрата модуля усредненной траектория квазиклассического движения в потенциале α/x^2 , которая имеет смысл степени рождения частиц горизонтом событий.

Рассмотрим скалярное поле в $1 + 1$ пространстве и времени с метрикой:

$$ds^2 = B(r)dt^2 - B^{-1}(r)dr^2 \quad (1)$$

где $B(r)$ имеет простой ноль в $r = r_0$ и $B'(r) = \frac{dB}{dr}$ не равно нулю и конечно в точке r_0 . Исчезновение $B(r)$ в точке r_0 говорит о присутствии горизонта событий. Рядом с горизонтом событий разложим $B(r)$ как:

$$B(r) = B'(r_0)(r - r_0) + \mathcal{O}[(r - r_0)^2] \approx B'(r_0)(r - r_0) \quad (2)$$

Заметим, что в случае Шварцшильда $B'(r_0) = r_0^{-1}$ где $r_0 = 2M$ – радиус Шварцшильда.

Уравнение поля для скалярного поля $\Phi(t, r)$:

$$\left(\square + \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \right) \Phi = 0 \quad (3)$$

где \square – оператор Д'Аламбера. $\square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$.

С метрикой написанной в уравнении (1)

$$c^{-2} B(r)^{-1} \partial_t^2 \Phi - \partial_r (B(r) \partial_r \Phi) = -m_0^2 c^2 \hbar^{-2} \Phi \quad (4)$$

Подставляя в уравнение (4) в качестве Φ :

$$\Phi(r, t) = e^{-i\omega t} \frac{\psi(r)}{\sqrt{B(r)}} \quad (5)$$

получим что $\psi(r)$ удовлетворяет уравнению:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2\psi(r)}{dr^2} - \frac{\alpha}{(r - r_0)^2} \psi(r) = 0 \quad (6)$$

где $\alpha = \frac{\hbar^2\omega^2}{2c^2[B'(r_0)]^2}$ рядом с горизонтом события.

Для метрики Шварцшильда $\alpha = \frac{\hbar^2\omega^2r_0^2}{2c^2}$

Таким образом введя $x = (r - r_0)$, и $\tilde{\alpha} = \alpha/m$ уравнение (6) превращается в уравнение Шредингера для частицы в обратно квадратичном потенциале $-\tilde{\alpha}/x^2$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{\tilde{\alpha}}{x^2} \psi(x) = \mathcal{E}\psi(x) \quad (7)$$

Также устремим $\mathcal{E} \rightarrow 0$

Таким образом проблема скалярного поля в фоне Шварцшильда эквивалентна квантово-механической задаче о движении частицы в обратном квадратичном потенциале вблизи начала координат.

Теперь покажем связь с температурой черной дыры:

Сведя проблему скалярного поля в фоне Шварцшильда к квантово-механической задаче о движении частицы в обратном квадратичном потенциале, определим параметры в потенциале:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\alpha^2 + \frac{1}{4} \right) \frac{1}{x^2} = -\frac{\hbar^2\omega^2r_0^2}{2mc^2} \frac{1}{x^2} \quad (8)$$

что в высокочастотном пределе выражает α как:

$$\alpha = \left(\frac{\omega^2r_0^2}{c^2} - \frac{1}{4} \right)^{1/2} \approx \frac{\omega r_0}{c} \quad (9)$$

Далее в статье [1] путем громоздких вычислений интеграла по траекториям и переходя к предельным случаям связанным к движению вблизи горизонта событий было получено выражение для $d|X|^2/dt$:

$$\frac{d|X(t)|^2}{dt} = \left(\frac{4\hbar}{m\alpha} \right) \left(\alpha^2 + \frac{1}{4} \right) \left[N + \frac{1}{2} \right] \quad (10)$$

где $N = \frac{1}{e^{2\pi\alpha} - 1}$

Подставляя (9) в (10) и учитывая что $r_0 = 2M$ получим:

$$\frac{d|X(t)|^2}{dt} = \frac{8GM}{mc^3} \left[\hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (11)$$

где

$$N = \frac{1}{e^{2\pi\alpha} - 1} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad (12)$$

С температурой данной в виде:

$$T = \frac{\hbar c^3}{4\pi G M k_B} = \frac{1}{4\pi M} \quad (13)$$

Заметим что температура (13) дважды больше стандартной температуры Хокинга, это объясняется использованием сингулярных координат в горизонте событий.

2.2 Поиск когерентных состояний

2.2.1 Постановка задачи

В настоящей статье была поставлена задача получить выражение для $d|X|^2/dt$, где X - усредненная траектория квазиклассического движения в потенциале a/x^2 , избежав громоздких вычислений интеграла по траекториям.

Первоначально было предпринята попытка получить это выражение аналогично [2] построив когерентное состояние $|\varepsilon(t)\rangle$ и вычислить $X(t) = \langle \varepsilon(t) | x | \varepsilon(t) \rangle$, а затем $|X|^2$ и $|X|^2/dt$.

2.2.2 Когерентные состояния

Когерентное состояние - состояние квантовой системы, по своим свойствам максимально близкое к классическому состоянию. В когерентном состоянии минимизируется соотношение неопределенности:

$$\Delta A \Delta B = \frac{\hbar}{2} |\langle C \rangle| \quad (14)$$

Используя [7] покажем:

Рассмотрим эрмитовы операторы $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, $\hat{B} = \hat{B}^\dagger$ со сдвигом на их среднее значение в заданном состоянии $|\Psi\rangle$

$$\hat{a} = \hat{A} - \bar{A}, \quad \hat{b} = \hat{B} - \bar{B} : \quad \bar{A} = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle, \quad \bar{B} = \langle \Psi | \hat{B} | \Psi \rangle \quad (15)$$

Коммутатор операторов

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar \hat{C} \quad (16)$$

после сдвига не изменяется, так что

$$[\hat{a}, \hat{b}] = i\hbar \hat{C} \quad (17)$$

Средние операторы \hat{a} и \hat{b} по построению равны нулю:

$$\langle \Psi | \hat{a} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{A} - \bar{A} | \Psi \rangle = 0, \quad \langle \Psi | \hat{b} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{B} - \bar{B} | \Psi \rangle = 0 \quad (18)$$

в то время как их дисперсии совпадают с дисперсиями \hat{A} , \hat{B} :

$$(\Delta a)^2 = \langle \Psi | \hat{a}^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | (\hat{A} - \bar{A})^2 | \Psi \rangle = (\Delta A)^2 \quad (19)$$

$$(\Delta b)^2 = \langle \Psi | \hat{b}^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | (\hat{B} - \bar{B})^2 | \Psi \rangle = (\Delta B)^2 \quad (20)$$

Составим вектор

$$|\Phi\rangle = (\hat{a} - i\xi \hat{b}) |\Psi\rangle \quad (21)$$

где $\xi \in \mathbb{R}$ - вещественное число, и найдем его неотрицательную норму

$$\langle \Phi | \Phi \rangle \geq 0 \quad (22)$$

так что ввиду эрмитовости операторов

$$\langle \Psi | (\hat{a} - i\xi \hat{b})^\dagger (\hat{a} - i\xi \hat{b}) | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{a}^2 - i\xi (\hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a}) + \xi^2 \hat{b}^2 | \Psi \rangle \geq 0 \quad (23)$$

что с учетом коммутатора

$$[\hat{a}, \hat{b}] = i\hbar \hat{C} \quad (24)$$

дает полином по ξ :

$$\xi^2 (\Delta B)^2 + \hbar \langle C \rangle \xi + (\Delta A)^2 \geq 0 \quad (25)$$

Другими словами, это квадратное уравнение по ξ либо не имеет вещественных корней, либо два вещественных корня совпадают. Такая ситуация имеет место тогда и только тогда, когда дискриминант неположителен

$$\mathcal{D} \leq 0 \Leftrightarrow \hbar^2 \langle C \rangle^2 - 4(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \leq 0 \quad (26)$$

Откуда получаем соотношение неопределенностей для дисперсий (флуктуаций) наблюдаемых (эрмитовых) величин A и B

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{\hbar}{2} |\langle C \rangle|, \text{ или } \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle| \quad (27)$$

Очевидно что соотношение неопределенностей минимизируется, если детерминант равен нулю и существует единственный вещественный корень для параметра $\xi = \gamma \in \mathbb{R}$. При этом значении параметра составленный нами вектор состояния $|\Phi\rangle$ имеет нулевую норму, а значит, и сам он равен нулю, $|\Phi\rangle = 0$, т.е.

$$(\hat{a} - i\gamma\hat{b})|\Psi\rangle = 0 \Leftrightarrow (\hat{A} - \bar{A})|\Psi\rangle = i\gamma(\hat{B} - \bar{B})|\Psi\rangle, \gamma \in \mathbb{R} \quad (28)$$

Примечательно, что это уравнение линейно по операторам наблюдаемых величин. Равенство нулю детерминанта определяет значение γ , так как уравнение принимает вид

$$\hbar^2 \langle C \rangle^2 \xi^2 + 4(\Delta A)^2 \langle C \rangle \xi + 4(\Delta A)^4 = 0 \quad (29)$$

с единственным корнем

$$\gamma = -2 \frac{(\Delta A)^2}{\hbar \langle C \rangle}, \Rightarrow |\gamma| = \frac{\Delta A}{\Delta B}; \quad \langle C \rangle \neq 0 \quad (30)$$

Поскольку для заданного состояния $\langle C \rangle$ - некоторое число, то физический смысл параметра γ сводится к тому, что он пропорционален дисперсии наблюдаемой A .

Гамильтониан гармонического осциллятора:

$$\hat{H} = \hbar\omega\hat{H}_{\mathcal{Q}}, \quad \hat{H}_{\mathcal{Q}} = \frac{1}{2} \left\{ \hat{\mathcal{P}}^2 + \hat{\mathcal{Q}}^2 \right\} \quad (31)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{P}} &= \frac{\hat{p}}{p_{osc}}, \quad p_{osc} = \sqrt{m\omega\hbar} \\ \hat{\mathcal{Q}} &= \frac{\hat{q}}{q_{osc}}, \quad q_{osc} = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \\ \hat{\mathcal{H}}_{\mathcal{Q}} &= \frac{\hat{H}}{E_{osc}}, \quad E_{osc} = \frac{p_{osc}^2}{m} = \hbar\omega \end{aligned}$$

а коммутационные соотношения принимают вид

$$[\hat{\mathcal{Q}}, \hat{\mathcal{P}}] = i, \quad \hat{\mathcal{P}}_{\mathcal{Q}} = -i \frac{\partial}{\partial \mathcal{Q}} \quad (32)$$

Мы показали, что соотношение неопределенностей двух наблюдаемых \hat{A} и \hat{B} минимизируется, если в гильбертовом пространстве квантовых состояний существует такое состояние $|\Psi\rangle$, что верно (28) и (30)

Для операторов $\hat{\mathcal{Q}}$ и $\hat{\mathcal{P}}$ согласно уравнению (28), где $\hat{A} \mapsto \hat{\mathcal{Q}}$ и $\hat{B} \mapsto \hat{\mathcal{P}}$, введем состояние $|\alpha\rangle$ в координатном представлении $\langle \mathcal{Q} | \alpha \rangle \equiv \psi_{\alpha}(\mathcal{Q})$, которое минимизирует соотношение неопределенностей со средними значениями $\langle \mathcal{Q} \rangle \equiv \langle \alpha | \mathcal{Q} | \alpha \rangle \equiv \mathcal{Q}_0$ и $\langle \mathcal{P} \rangle \equiv \langle \alpha | \mathcal{P} | \alpha \rangle \equiv \mathcal{P}_0$, и, следовательно,

$$(\mathcal{Q} - \mathcal{Q}_0)\psi_{\alpha}(\mathcal{Q}) = i\gamma \left(-i \frac{\partial}{\partial \mathcal{Q}} - \mathcal{P}_0 \right) \psi_{\alpha}(\mathcal{Q}) \Leftrightarrow \left(\mathcal{Q} - \gamma \frac{\partial}{\partial \mathcal{Q}} \right) \psi_{\alpha}(\mathcal{Q}) = (\mathcal{Q}_0 - i\gamma\mathcal{P}_0)\psi_{\alpha}(\mathcal{Q}) \quad (33)$$

Это обыкновенное дифференциальное уравнение легко решается в общем виде, так как

$$\frac{d\psi_{\alpha}}{\psi_{\alpha}} = d\mathcal{Q} \frac{1}{\gamma} (\mathcal{Q} - \mathcal{Q}_0 + i\gamma\mathcal{P}_0), \quad (34)$$

откуда

$$\psi_\alpha(\mathcal{Q}) = \psi_0 e^{\frac{(\mathcal{Q}-\mathcal{Q}_0)^2}{2\gamma} + i\mathcal{P}_0 \mathcal{Q}} \quad (35)$$

и с учетом

$$\gamma = -2i \frac{(\Delta \mathcal{Q})^2}{\langle [\hat{\mathcal{Q}}, \hat{\mathcal{P}}] \rangle} = -2(\Delta \mathcal{Q})^2 \quad (36)$$

находим

$$\psi_\alpha(\mathcal{Q}) = \psi_0 e^{-\frac{(\mathcal{Q}-\mathcal{Q}_0)^2}{4(\Delta \mathcal{Q})^2} + i\mathcal{P}_0 \mathcal{Q}} \quad (37)$$

Итак, для произвольной системы мы можем изготовить состояния гауссового типа, которое минимизирует соотношение неопределенностей координата-импульс в начальный момент времени. Но это не значит что составленный таким образом волновой пакет сохранит это свойство минимизации в ходе эволюции: волновой пакет может расплыться, причем зависимость произведения дисперсий от времени определяется как гамильтонианом физической системы, так и параметрами начального состояния. Особый интерес представляют системы для которых можно построить динамически устойчивые волновые функции, минимизирующие соотношение неопределенностей координата-импульс во все моменты времени.

Итак, расплывание волнового пакета, минимизирующего соотношение неопределенностей координата-импульс, зависит, во-первых, от величины параметра γ , который входит в уравнение (33) и связан с параметром сжатия

$$|\zeta| \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{2} \ln(-\gamma) \quad (38)$$

а во-вторых, от гамильтониана системы, задающего эволюцию волнового пакета.

Квантовые состояния, представляющие из себя нераспывающиеся со временем гауссовые волновые пакеты, в максимальной степени соответствуют движению исходной классической системы. Именно такие квантовые состояния называются *когерентными*.

Так как по определению когерентное состояние максимально близко к классическому, по найденным волновым функциям описывающим когерентные состояния вычисляется:

$$|\langle X \rangle|^2 = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx \right|^2 \quad (39)$$

тогда $|\langle X \rangle|^2 \approx |X|^2$, где $|X|^2$ - квадрат модуля усредненной траектории квазиклассического движения в потенциале α/x^2 ,

2.2.3 Связь с задачей $H = -d_x^2/2 + x^2/2 + g^2 x^{-2}$

Приведем выкладки из [2], где потенциал отличается от потенциала рассматриваемого в данной статье на слагаемое пропорциональное $x^2/2$ и коэффициентом перед x^{-2} :

$$H = H_0 + V$$

$$H_0 = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{x^2}{2} = a^+ a^- + \frac{1}{2}, \quad V = g x^{-2} \quad (40)$$

где $a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (x - \frac{d}{dx})$ - оператор рождения, $a^- = \frac{1}{\sqrt{2}} (x + \frac{d}{dx})$ - оператор уничтожения.

Так как операторы

$$B_2^+ = (a^+)^2 - g^2/x^2, \quad B_2^- = (a^-)^2 - g^2/x^2 \quad (41)$$

удовлетворяют соотношениям

$$[H, B_2^+] = 2B_2^+, \quad [H, B_2^-] = -2B_2^- \quad (42)$$

$$[B_2^-, B_2^+] = 4H \quad (43)$$

то H , B_2^+ , B_2^- являются генераторами алгебры Ли группы $SU(1, 1)$.

Связь операторов H , B_2^+ , B_2^- со стандартными генераторами K_0 , K_1 , K_2 алгебры $SU(1, 1)$ задается формулами:

$$K_0 = H/2, \quad K_+ = K_1 + iK_2 = -B_2^+/2 \quad (44)$$

$$K_- = K_1 - iK_2 = -B_2^-/2 \quad (45)$$

Система когерентных состояний $|\zeta\rangle$, $|\zeta| < 1$, в гильбертовом пространстве \mathbb{H} квадратично интегрируемых функций на полуоси $0 < x < \infty$ имеет вид:

$$|\zeta\rangle = (1 - |\zeta|^2)^k \sum_n \sqrt{\frac{\Gamma(n + 2k)}{\Gamma(n + 1)\Gamma(2k)}} \zeta^n |n\rangle \quad (46)$$

где $k = (1/2 + \alpha)/2$, α возникает из $E_0 = \alpha + 1/2$, E_0 -нулевой энергетический уровень

Когерентное состояние $|\zeta\rangle$ при этом можно определить как состояние, аннулируемое оператором:

$$\tilde{K}_- = \exp(\zeta K_+) K_- \exp(-\zeta K_+) = K_- - 2\zeta K_0 + \zeta^2 K_+ \quad (47)$$

$$\tilde{K}_- |\zeta\rangle = 0 \quad (48)$$

Отсюда получаем :

$$\langle x | \zeta \rangle \equiv \psi_\zeta(x) = \frac{\sqrt{2}}{\Gamma(2k)} \frac{(1 - |\zeta|^2)^k}{(1 - \zeta)^{2k}} x^\alpha \exp \left[-\frac{1}{2} \frac{1 + \zeta}{1 - \zeta} x^2 \right] \quad (49)$$

После неудачной попытки факторизовать $H = d_x^2 + \alpha x^{-2}$, (в разделе 4 будет показано, что для интересующего нас параметра α это сделать нельзя) была предпринята попытка численно найти волновые функции и энергетические уровни для уравнения Шредингера с потенциалом a/x^2 .

3 Численное решение стационарного уравнения Шредингера

3.1 Описание алгоритмов

Существует несколько численных методов решения уравнения Шредингера, которое является краевой задачей Штурма-Лиувилля. Среди них можно назвать метод конечных разностей, метод стрельбы, метод Монте-Карло и другие.

В данной работе был выбран метод конечных разностей. Метод конечных разностей (finite difference method) - это численный метод решения дифференциальных уравнений, который основан на аппроксимации производных функции на некоторой сетке. Основная идея метода заключается в том, чтобы заменить дифференциальное уравнение на конечную систему алгебраических уравнений, используя значения функции на сетке и ее производные. Кроме того, метод конечных разностей является относительно простым и вычислительно эффективным методом, который может быть легко реализован в виде компьютерной программы.

Для решения задачи на конечном интервале $[a, b]$ сетку можно задать следующим образом:

$$x_i = a + i\Delta x, \quad i = 1, 2, \dots, N - 1 \quad (50)$$

где N - число узлов сетки, Δx - шаг сетки.

Производные функции можно аппроксимировать разностными формулами на сетке. Например, для первой производной можно использовать центральную разностную формулу:

$$f'(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - f(x_{i-1})}{2\Delta x} \quad (51)$$

А для второй производной можно использовать центральную разностную формулу второго порядка:

$$f''(x_i) \approx \frac{f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})}{(\Delta x)^2} \quad (52)$$

Подставляя эти формулы в уравнение Шредингера и аппроксимируя потенциал на сетке получаем систему линейных уравнений, которую можно решить численно.

Метод конечных разностей имеет ряд преимуществ. Он относительно прост в реализации, эффективен с точки зрения вычислительных ресурсов, и может быть легко применен к задачам с различными граничными условиями и на произвольной геометрии. Однако, при использовании этого метода необходимо следить за выбором шага сетки, чтобы обеспечить достаточную точность решения.

3.2 Применение метода конечных разностей

Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (53)$$

Потенциал в настоящей работе неограничен снизу, поэтому решение уравнение Шредингера производится с двумя параметрами регуляризации β и L .

Первый параметр регуляризации β отвечает за устранение $-\infty$ в нуле:

$$V(x) = \frac{\alpha}{x^2 + \beta} \quad (54)$$

Устремляя β к 0 предполагается, что нижний уровень будет сходиться к верному (для задачи без регуляризации).

Второй параметр регуляризации отвечает за установление граничных условий $\psi(-\infty) = 0$ и $\psi(\infty) = 0$. Устремляя L к ∞ мы получаем решение задачи на \mathbb{R} , решая задачу на интервале $x \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$ с граничными условиями $\psi(-\frac{L}{2}) = \psi(\frac{L}{2}) = 0$. Используя метод конечных разностей (52), мы можем аппроксимировать производные в уравнении Шредингера на сетке с шагом Δx :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\Delta x)^2} + \frac{\alpha}{x^2 + \beta} \psi_i = E\psi_i, \quad i = 1, 2, \dots, N-1 \quad (55)$$

где $\psi_i = \psi(x_i)$, $x_i = -\frac{L}{2} + i\Delta x$, и N - число узлов сетки. Группируя множители к системе линейных уравнений вида $H\psi = E\psi$, где H - трехдиагональная матрица

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{i+1}}{(\Delta x)^2} + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{\alpha}{x^2 + \beta} \right) \psi_i - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\psi_{i-1}}{(\Delta x)^2} = E\psi_i \quad (56)$$

Вид трехдиагональной матрицы H :

$$H = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & a_{N-2} & b_{N-2} & c_{N-2} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & a_{N-1} & b_{N-1} \end{pmatrix}, \quad a_i = c_i = -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}, \quad b_i = \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + \frac{\alpha}{x^2 + \beta}. \quad (57)$$

После применения метода конечных разностей к уравнению Шредингера, мы получили систему линейных уравнений, которую можно представить в виде трехдиагональной матрицы. Эта матрица является также является симметричной, а решение задачи сводится к нахождению ее собственных значений и собственных векторов.

После запуска программы для различных точностей разбиения отрезка и различных параметров регуляризации было выяснено, что вне зависимости от $a < -\frac{\hbar^2}{8m}$, $a > -\frac{\hbar^2}{8m}$, $a = -\frac{\hbar^2}{8m}$ (смысл этих соотношений с точностью до домножения на константу $\frac{\hbar^2}{2m}$ показан в [3], [4], [5] и приведен в разделе 4) нижний уровень энергии E_0 зависит от параметра регуляризации β :

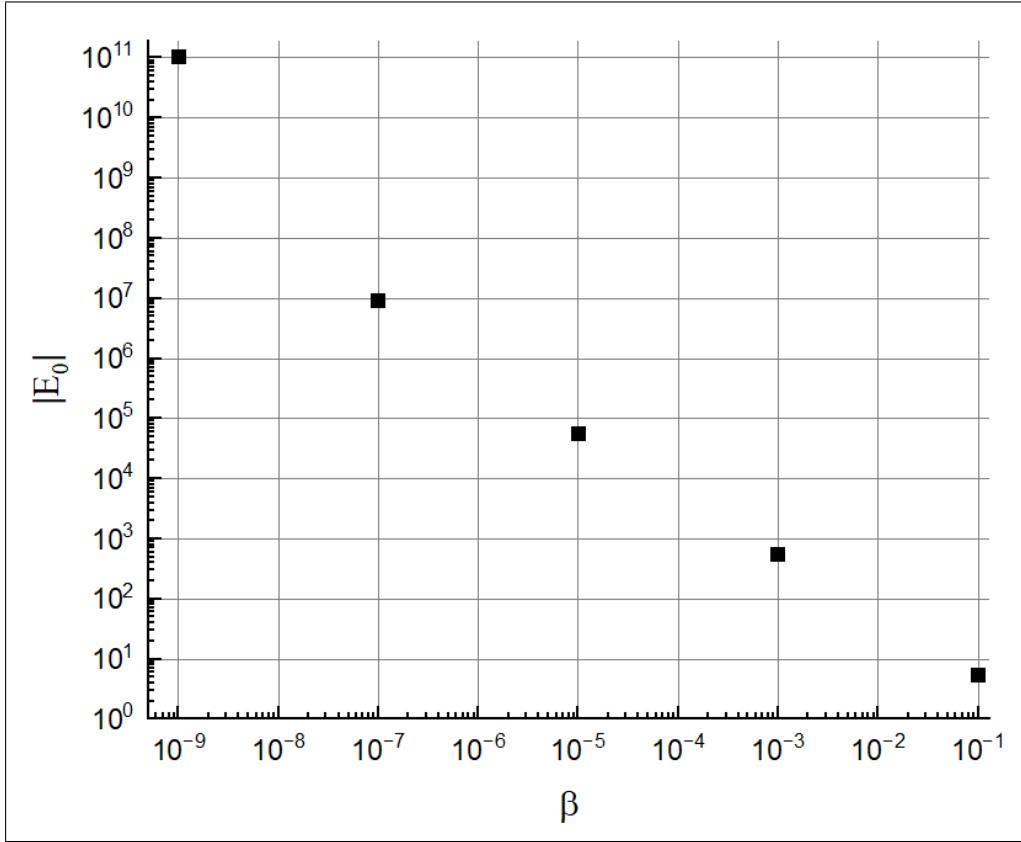


Рис. 1: Зависимость модуля нулевого уровня энергии $|E_0|$ от параметра регуляризации β

На графике видно, что при устремлении к нулю параметра регуляризации β нижний уровень энергии не имеет предела. Это означает что, данный подход не применим к данному вырожденному потенциалу.

4 Параметр α

В работах [3], [4], [5] рассматривается факторизация гамильтониана на \mathbb{R}_+ :

$$\hat{H} = -d_x^2 + \alpha x^{-2} \quad (58)$$

Оказывается что H можно факторизовать (представить как $\hat{H} = \hat{b}\hat{a}$, где $\hat{b} = \hat{a}^\dagger$) в зависимости от параметра α . В статье [4] рассматриваются следующие 4 случая:

- $\alpha \geq 3/4$
- $-1/4 < \alpha < 3/4$
- $\alpha = -1/4$
- $\alpha < -1/4$

Оказывается что для параметра $\alpha < -1/4$, H - не представим как произведение двух взаимно-сопряженных операторов и число отрицательных собственных значений бесконечно.

Для случая $-1/4 \leq \alpha < 3/4$ число отрицательных собственных значений не превышает единицы.

И для $\alpha > 3/4$ нет отрицательных собственных значений.

Так как нас интересует случай $\alpha < -1/4$, именно он рассматривается в [1], мы не можем решить поставленную задачу как в разделе 2.2.3. Поэтому величины $|X|^2$ и $d|X|^2/dt$ находятся путем численного решения нестационарного уравнения Шредингера.

5 Численное решение нестационарного уравнения Шредингера

5.1 Постановка задачи

Как было показано в 2.2.2, минимальное соотношение неопределенностей имеет гауссов пакет. Для вычисления $|X|^2$ и $d|X(t)|^2/dt$ было решено нестационарное уравнение Шредингера с начальным условием ψ_0 - волновая функция в момент времени $t = 0$ имеет вид:

$$\psi_0 = N e^{-\zeta(x-x_0)^2}, \quad N = \frac{1}{\int_{-L/2}^{L/2} (e^{-\zeta(x-x_0)^2}) (e^{-\zeta(x-x_0)^2})^* dx} \quad (59)$$

где ζ отвечает за локализацию волнового пакета (для корректной работы алгоритма волновая функция должна „хорошо“ убывать на расстоянии $L/2$ от начала координат), x_0 отвечает за сдвиг волнового пакета (тем самым можно проследить процесс падения частицы на центр).

5.2 Описание методов

5.2.1 Метод конечных разностей

Определив β и L аналогично 3.2, нестационарное уравнение Шредингера для потенциала $V(x) = \frac{\alpha}{x^2 + \beta}$:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + \frac{\alpha}{x^2 + \beta} \psi(x, t) \quad (60)$$

с граничными условиями :

$$\psi\left(-\frac{L}{2}, t\right) = \psi\left(\frac{L}{2}, t\right) = 0 \quad (61)$$

$$\psi(x, 0) = \psi_0 \quad (59) \quad (62)$$

Аналогично 3.2 пространственную область дискретизируем равномерной сеткой с шагом Δx , временную область дискретизируем равномерной сеткой с шагом Δt так что:

$$\psi_j^m = \psi\left(-\frac{L}{2} + j\Delta x, m\Delta t\right) \quad (63)$$

Учитывая

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) = \frac{\psi_{j+1}^m - 2\psi_j^m + \psi_{j-1}^m}{\Delta x^2} \quad (64)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \frac{\psi_j^{m+1} - \psi_j^m}{\Delta t} \quad (65)$$

и положив $\hbar = 1$ получим разностную аппроксимацию нестационарного уравнения Шредингера:

$$i \frac{\psi_j^{m+1} - \psi_j^m}{\Delta t} = -\frac{1}{2m} \frac{\psi_{j+1}^m - 2\psi_j^m + \psi_{j-1}^m}{\Delta x^2} + V_j \psi_j^m \quad (66)$$

$$\psi_j^{m+1} = \psi_j^m + \frac{i}{2m} \frac{\Delta t}{\Delta x^2} (\psi_{j+1}^m - 2\psi_j^m + \psi_{j-1}^m) - i\Delta t V_j \psi_j^m \quad (67)$$

Таким образом, разностная схема сводит задачу решения нестационарного уравнения Шредингера к задаче решения системы алгебраических уравнений на каждом временном слое.

Условие устойчивости для сходимости явного метода - $\frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ мало.

5.2.2 Аппроксимация оператора эволюции схемой Кранка-Николсона

Для решения нестационарного уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t) \quad (68)$$

можно использовать оператор эволюции, который связывает волновую функцию в начальный момент времени t_0 с волновой функцией в момент времени t :

$$\psi(x, t) = \hat{U}(t, t_0) \psi(x, t_0) \quad (69)$$

В работе [8] была произведена аппроксимация оператора эволюции на временной сетке

$$[0, T], \quad t_j = j\Delta t, \quad j = 0, 1, 2, \dots, J \quad J\Delta t = T \quad (70)$$

получаем:

$$\hat{U}(t_{j+1}, t_j) = \left(\hat{I} + i\frac{\Delta t}{2} \hat{H} \right)^{-1} \left(\hat{I} - i\frac{\Delta t}{2} \hat{H} \right) \quad (71)$$

где \hat{I} - единичная матрица, \hat{H} - гамильтониан. Тогда решение на временном слое t_{k+1} выражается через решение на слое t_k с помощью

$$\psi(t_{j+1}) = \hat{U}(t_{j+1}, t_j) \psi(t_j) \quad (72)$$

Главным достоинством этого метода является унитарность оператора $\hat{U}(t_{j+1}, t_j)$, которая обеспечивает устойчивость и сходимость численной схемы. Гамильтониан H (57) такой же как и в разделе 3.2.

5.3 Результаты работы численных методов

5.3.1 Результаты методом конечных разностей

Было сравнены численные и теоретические результаты для гармонического осциллятора. Результат сравнения показал корректность работы программы. При запуске программы для потенциала $-1/x^2$ и при уменьшении параметра регуляризации были получены „характерные осцилляции“:

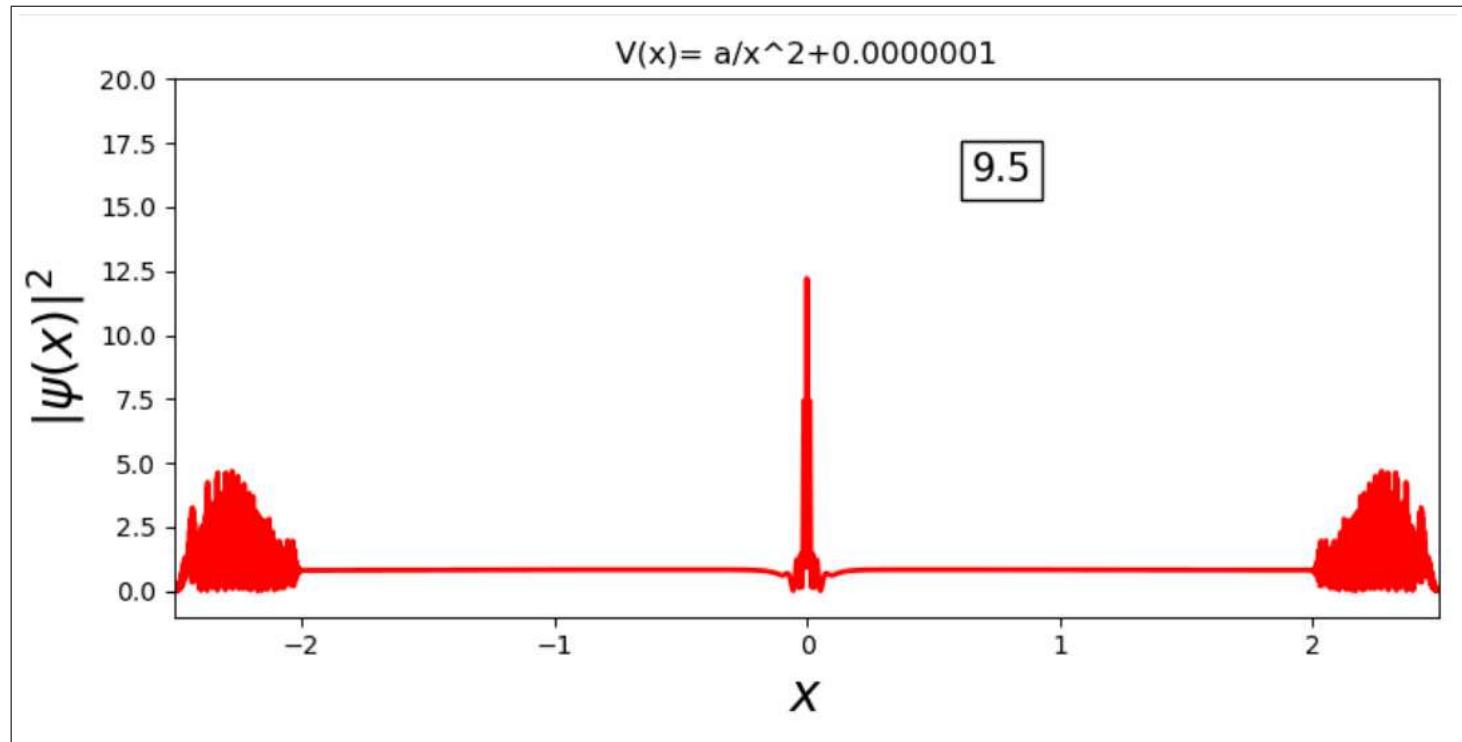


Рис. 2: Характерные осцилляции квадрата модуля волновой функции

Это свидетельствуют о том, что явная схема метода конечных разностей не применима к данной проблеме.

5.3.2 Результаты методом аппроксимации оператора эволюции

Было сравнены численные и теоретические результаты для гармонического осциллятора. Результат сравнения показал корректность работы программы.

При запуске программы было обнаружено что при уменьшении β - параметра регуляризации отвечающего за устранение $-\infty$ в нуле, и при увеличении L - параметра регуляризации отвечающего за краевые условия ($\psi(-\infty) = \psi(\infty) = 0$) результаты расчетов сходятся. Из этого нельзя сделать вывод, что решение сойдется к решению задачи без параметров регуляризации, так как уменьшая параметр регуляризации β , Δx должно быть порядка β . Вычислительная мощность обычного ПК не позволяет производить расчет с разбиением больше 1000 точек на единичный отрезок поэтому при уменьшении $\beta = 1 \times 10^{-7}$ до $\beta = 1 \times 10^{-30}$ результат работы программы изменяется незначительно.

Тем не менее для фиксированного $L = 10$ приведем результат работы программы для различных β :

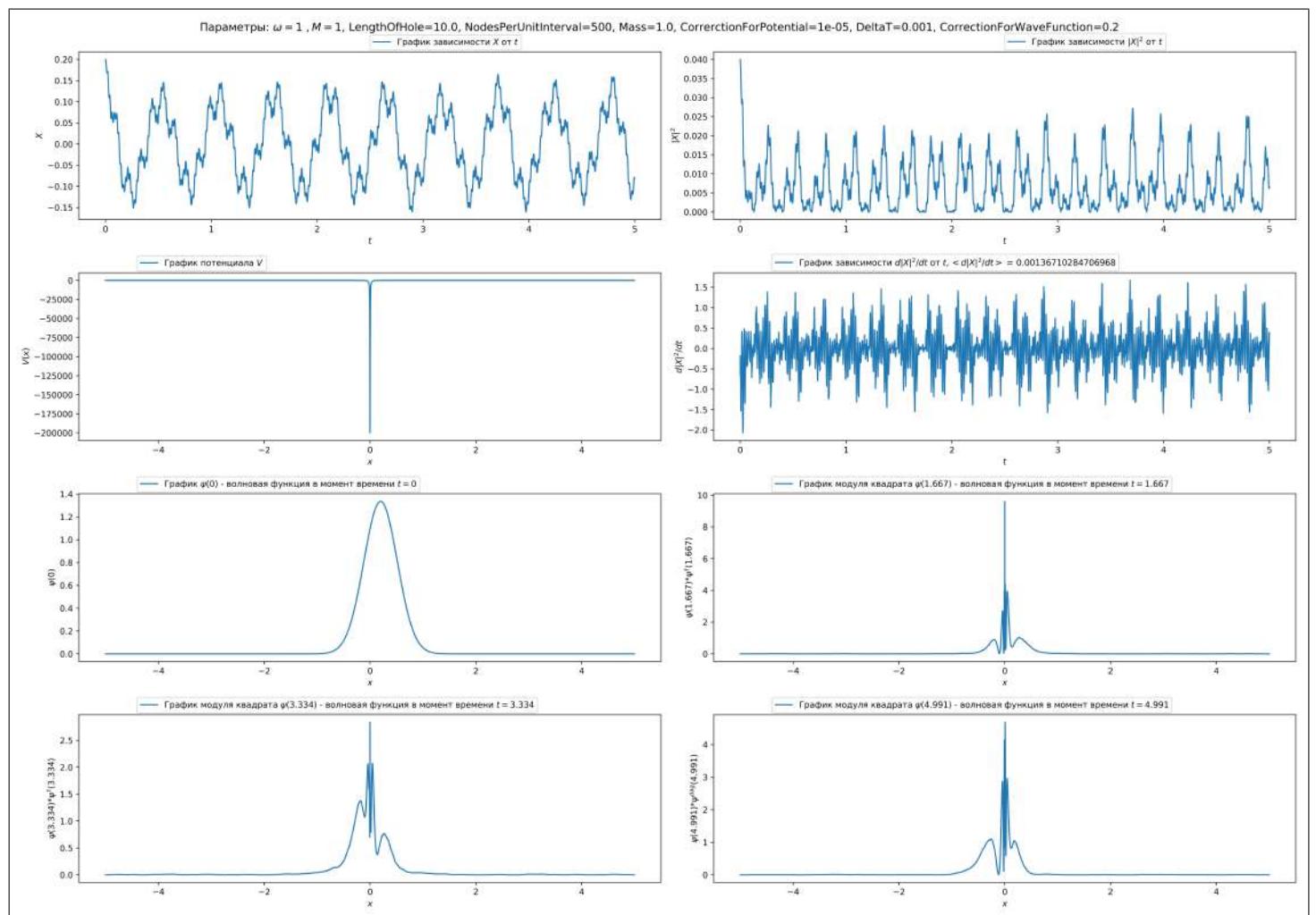


Рис. 3: Параметр регуляризации $\beta = 1 \times 10^{-5}$

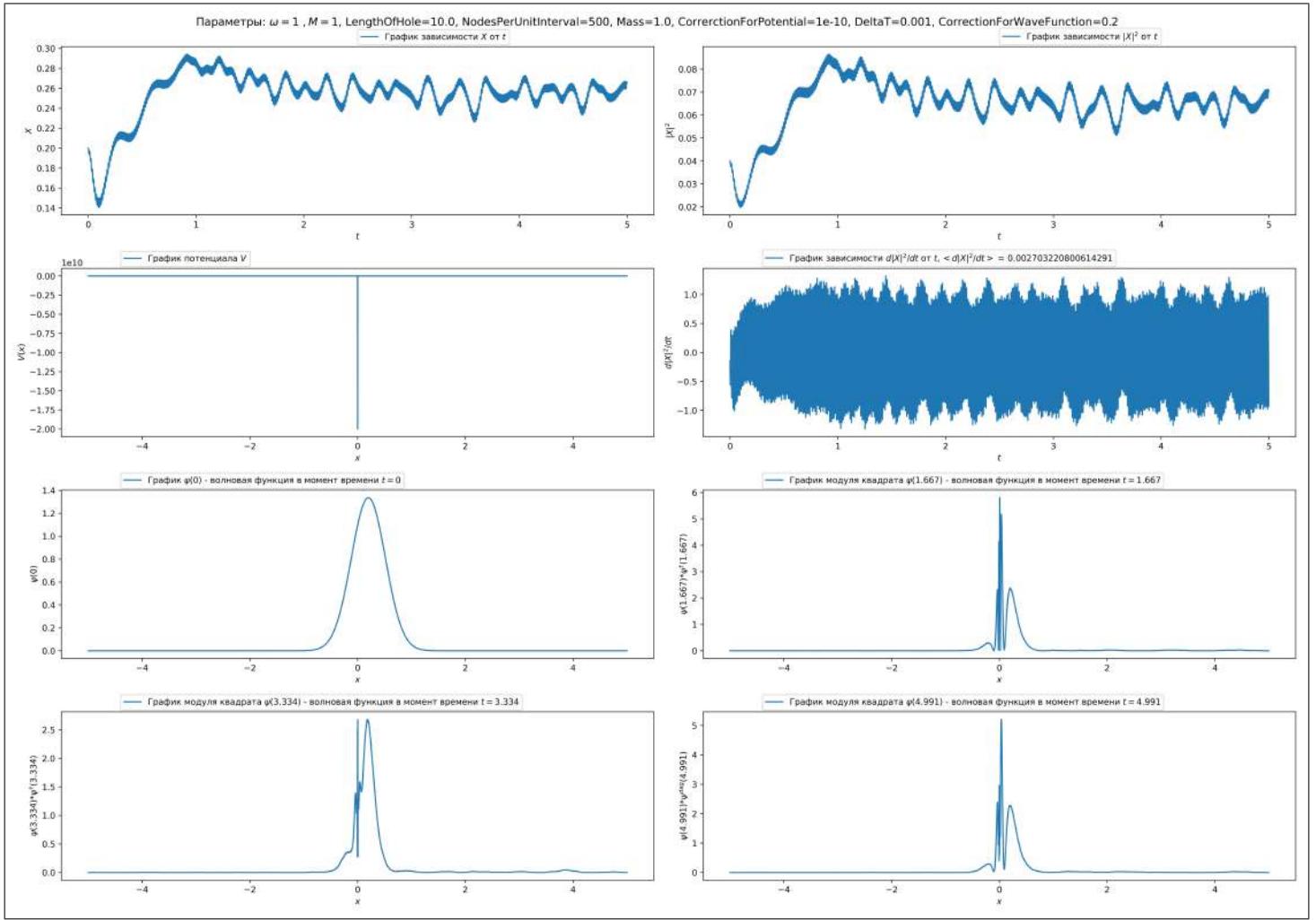


Рис. 4: Параметр регуляризации $\beta = 1 \times 10^{-10}$

На рисунке 4 расположено:

- 1.1. Зависимость X от t , где X - усредненная траектория квазиклассического движения.
- 1.2. Зависимость $|X|^2$ от t , где $|X|^2$ - квадрат модуля усредненной траектория квазиклассического движения.
- 2.1. Потенциал $V(x) = \frac{\alpha}{x^2 + \beta}$.
- 2.2. Зависимость $\frac{d|X(t)|^2}{dt}$ - производная квадрата модуля усредненной траектория квазиклассического движения.
- 3.1. Волновая функция в момент времени $t = 0$.
- 3.2. Квадрат модуля волновой функции в момент времени $t = T/3$, где T - время до которого производится расчет.
- 4.1. Квадрат модуля волновой функции в момент времени $t = T \cdot 2/3$.
- 4.2. Квадрат модуля волновой функции в момент времени $t = T$.

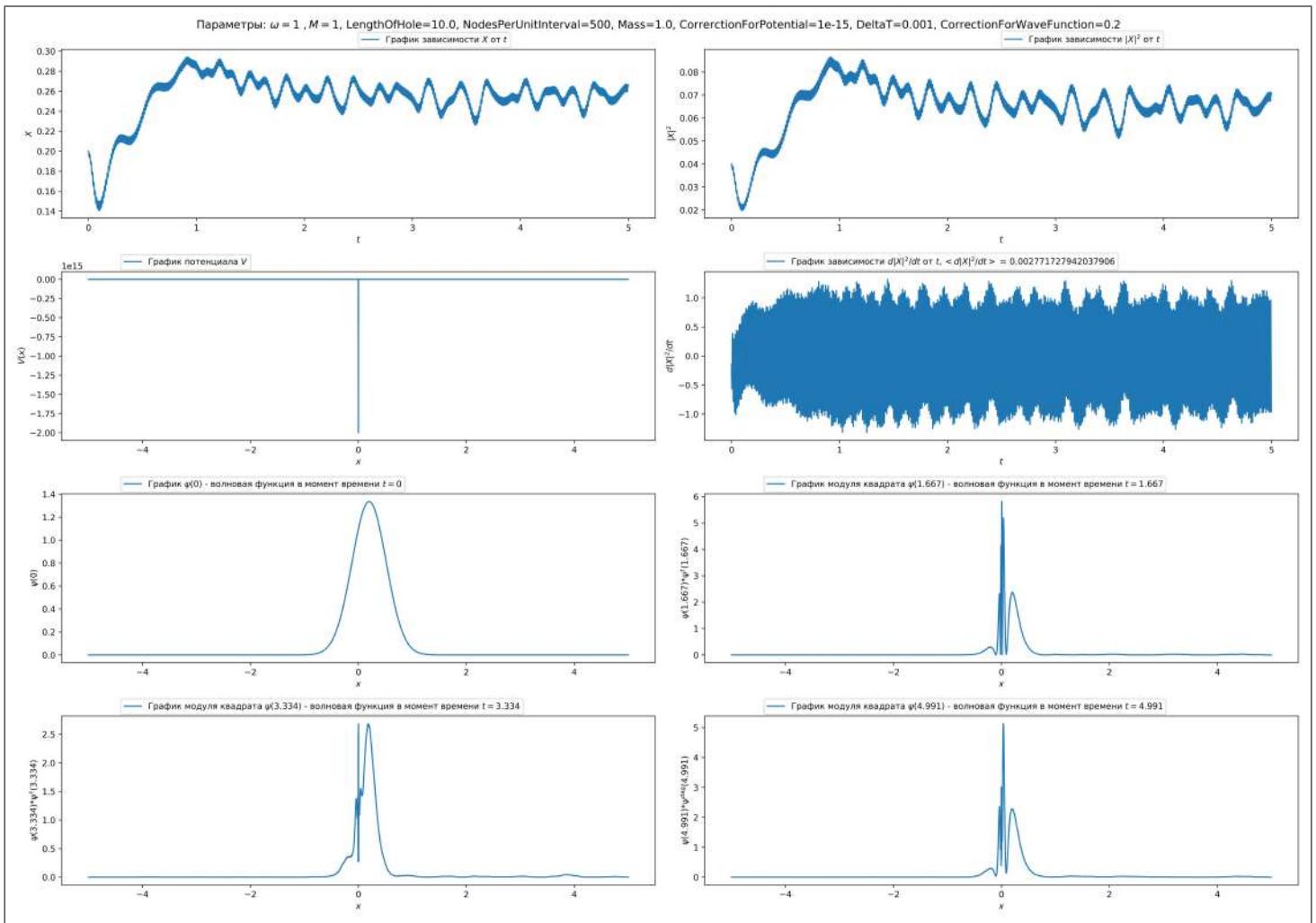


Рис. 5: Параметр регуляризации $\beta = 1 \times 10^{-15}$

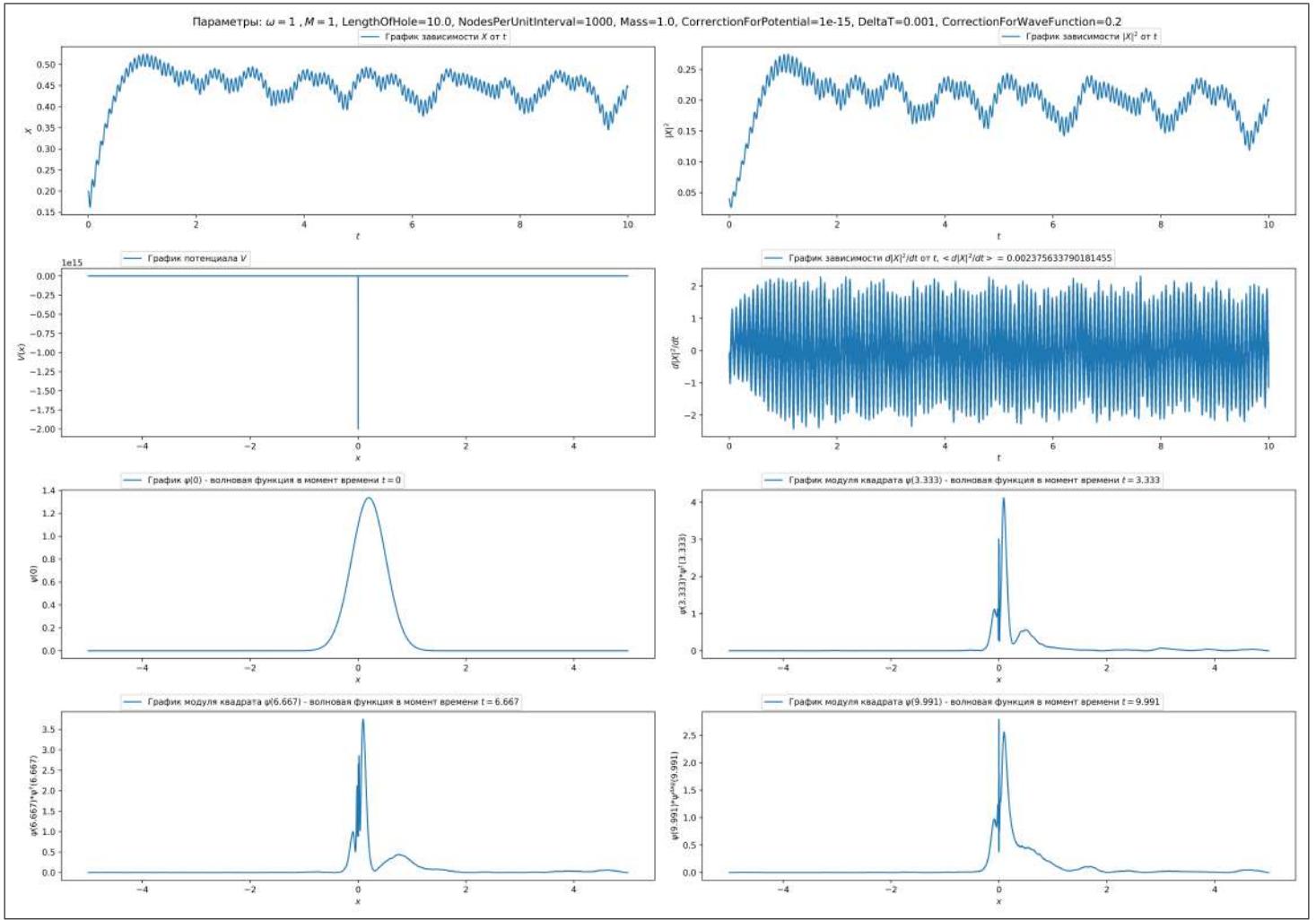


Рис. 6: Параметр регуляризации $\beta = 1 \times 10^{-15}$, точность разбиения - 1000 точек на единичный отрезок

На 3, 4, 5, 6 видна зависимость полученного решения (в частности $\langle \frac{d|X(t)|^2}{dt} \rangle$) от параметра β и точности разбиения.

По сравнению с 5.2.1 и 3.2 метод аппроксимации оператора эволюции схемой Кранка-Николсона показал наилучшую сходимость.

На 3, 4, 5, 6 центр волновой функции смещен на $x_0 = 0.2$ - это позволяет проследить процесс падения частицы на центр.

Полученный результат необычен, предполагалось, что частица почти моментально упадет на центр. Для выяснения этого приведем результат работы программы с параметрами 6, но для большего времени расчета:

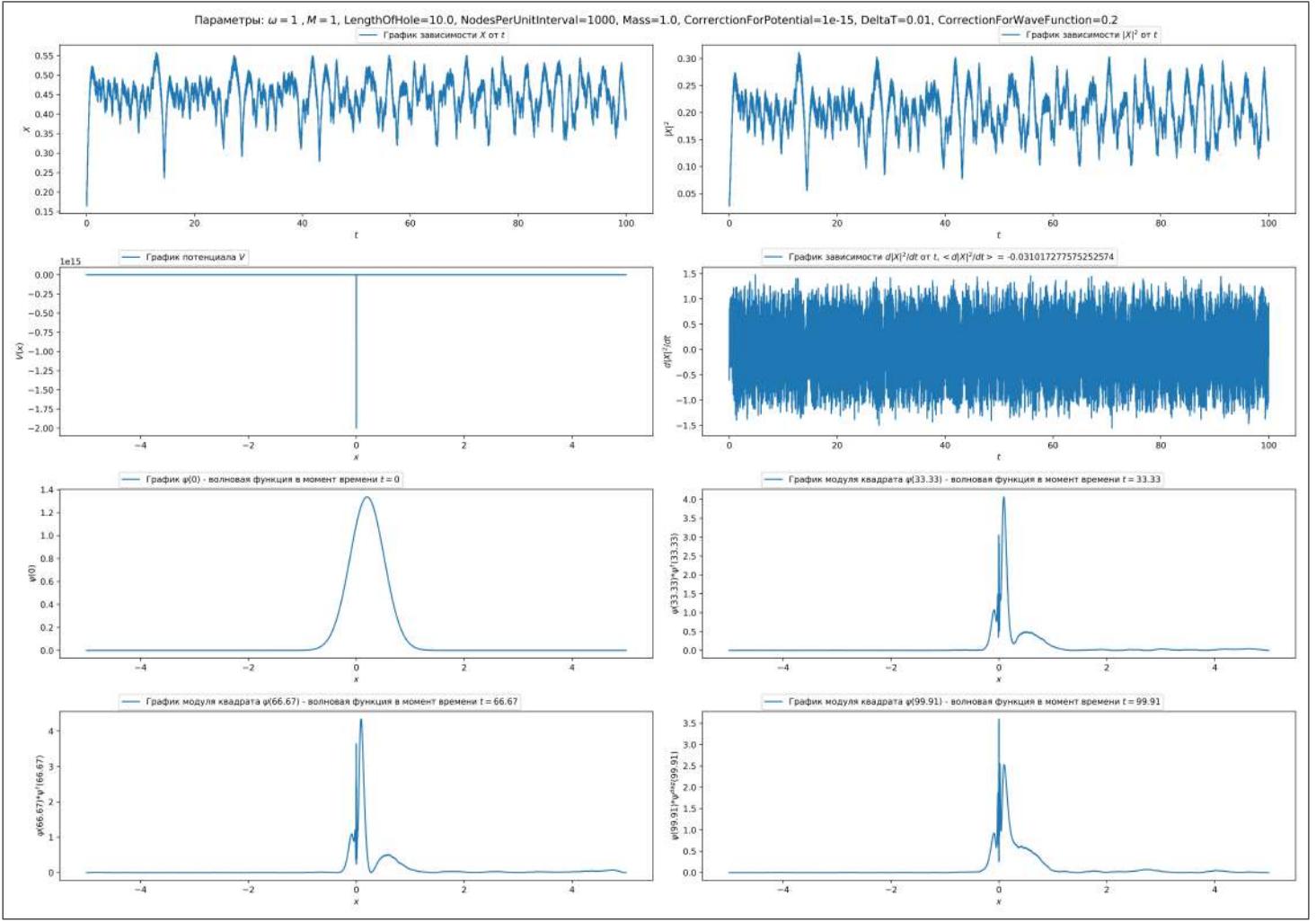


Рис. 7: Параметр регуляризации $\beta = 1 \times 10^{-15}$, точность разбиения - 1000 точек на единичный отрезок, время расчета- 100секунд (временной шаг был увеличен в 10 раз, это делает график более размытым).

Исходя из 7 мы не наблюдаем падения на центр.

6 Сравнение теоретических и численных результатов

Выразим связь между α и ω, M, t используя (8), (13) и соотношение $r_0 = 2M$

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(a^2 + \frac{1}{4} \right) \frac{1}{x^2} = -\frac{\hbar^2 \omega^2 r_0^2}{2mc^2} \frac{1}{x^2} \quad (73)$$

$$T = \frac{\hbar c^3}{4\pi G M k_B} = \frac{1}{4\pi M} \quad (74)$$

$$\alpha_{\text{num}} = \frac{\hbar^2 \omega^2 r_0^2}{2mc^2} = \frac{2\hbar^2 \omega^2 M^2}{mc^2} \quad (75)$$

Также выразим связь между $\frac{d|X(t)|^2}{dt}$ и $1/T$ используя (11) и (12)

$$\frac{d|X(t)|^2}{dt} = \frac{8GM}{mc^3} \left[\hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (76)$$

$$N = \frac{1}{e^{2\pi\alpha} - 1} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad (77)$$

$$\frac{d|X(t)|^2}{dt} = \frac{8G \frac{1}{4\pi T}}{mc^3} \left[\hbar\omega \left(\frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (78)$$

Учитывая что

$$\hbar = c = G = k_B = 1 \quad (79)$$

$$\frac{d|X(t)|^2}{dt} = \frac{2\omega}{T\pi m} \left(\frac{1}{e^{\omega/T} - 1} + \frac{1}{2} \right) \quad (80)$$

при $\omega/T \gg 1$

$$\frac{1}{e^{\omega/T} - 1} \approx 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d|X(t)|^2}{dt} = \frac{2\omega}{T\pi m} \left(\frac{1}{2} \right) = \frac{\omega}{\pi m} \frac{1}{T} \quad (81)$$

$$\frac{d|X(t)|^2}{dt} = \frac{\omega}{\pi m} \frac{1}{T}, \text{ так как } T = \frac{1}{4\pi M} \quad \Rightarrow \quad \frac{d|X(t)|^2}{dt} = \frac{4\omega M}{m} \quad (82)$$

Мы получили, что зависимость $\frac{d|X(t)|^2}{dt}$ от $\frac{\omega M}{m}$ должна быть линейной.

При запуске программы было обнаружено, что $\frac{d|X(t)|^2}{dt}$ зависит от времени. Это не позволяет сравнить результат с теоретическим. Усредненное по времени $\frac{d|X(t)|^2}{dt}$ существенно зависит от параметров временного разбиения отрезка.

На данном этапе работы была обнаружена ошибка в статье [1]:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\alpha^2 + \frac{1}{4} \right) \frac{1}{x^2} = -\frac{\hbar^2 \omega^2 r_0^2}{2mc^2} \frac{1}{x^2} \quad (83)$$

что выражает α в высокочастотном пределе как:

$$\alpha = \left(\frac{\omega^2 r_0^2}{c^2} - \frac{1}{4} \right)^{1/2} \approx \frac{\omega r_0}{c} \quad (84)$$

Подставляя (9) в (10) и учитывая что $r_0 = 2M$ получим:

$$\frac{d|X(t)|^2}{dt} = \frac{8GM}{mc^3} \left[\hbar \omega \left(N + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (85)$$

где

$$N = \frac{1}{e^{2\pi\alpha} - 1} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} \quad (86)$$

С температурой данной в виде:

$$T = \frac{\hbar c^3}{4\pi GM k_B} = \frac{1}{4\pi M} \quad (87)$$

так как $r_0 = 2M$

$$a = \left(\frac{\omega^2 r_0^2}{c^2} - \frac{1}{4} \right)^{1/2} = \left(\frac{4\omega^2 M^2}{c^2} - \frac{1}{4} \right)^{1/2} \quad (88)$$

Учитывая что

$$\hbar = c = k_B = 1 \quad (89)$$

$$\alpha = \sqrt{4\omega^2 M^2 - \frac{1}{4}} \quad (90)$$

так как

$$\sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{x}{2} + \dots, \quad \text{при } x \rightarrow 0 \quad (91)$$

получаем что

$$\alpha = 2M\omega \sqrt{1 + \frac{(-1)}{(4M\omega)^2}}, \quad \text{где } \frac{(-1)}{(4M\omega)^2} \rightarrow 0 \quad (92)$$

отсюда следует что:

$$\alpha = 2M\omega \sqrt{1 + \frac{(-1)}{(4M\omega)^2}} \approx 2M\omega \left(1 + \frac{(-1)}{32M^2\omega^2} \right) \approx 2M\omega \quad (93)$$

В формуле 84 мы видим, что в статье [1] пренебрегают $\frac{1}{4}$ по сравнению с $4\omega^2 M^2$

Но так как, учитывая $T = \frac{1}{4\pi M}$

$$N = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} = \frac{1}{e^{4\pi\omega M} - 1} \quad (94)$$

При больших $M \cdot \omega$ слагаемым N в формуле 85 можно пренебречь, тем самым он не является планковским.

В то же время если не пользоваться $M \cdot \omega \gg 1$ спектр не получается планковским, так как выражение 84 больше несправедливо.

7 Итоги работы

- Предпринята попытка свести задачу к 2.2.3 .
- Получено численное решение нестационарного уравнения Шредингера. Установлена расходимость решения от параметра регуляризации β 1.
- Были проанализированы работы [3], [4], [5]. Выяснилось что гамильтониан H нельзя факторизовать при рассматриваем в статье [1] параметре α .
- Поставлена задача 5.1.
- Двумя методами получено численное решение нестационарного уравнения Шредингера. Установлена расходимость метода конечных разностей для данного потенциала 2. Установлена сходимость метода аппроксимации оператора эволюции схемой Кранка-Николсона для доступных для расчета параметра β .
- Была исследована зависимость поведения решения от параметра регуляризации β 3, 4, 5, 6.
- Было указано необычное поведение решения при смещении центра гауссового пакета 3, 4, 5, 6, 7.
- Была найдена ошибка в статье [1].

8 Вывод

Для последующего численного рассмотрении потенциала $1/x^2$ написанную программу следует модифицировать следующим образом:

- Так как в настоящей программе производится равномерное разбиение отрезка L , что является большим недостатком программы так как производится расчет с огромной точностью (500-1000 точек на единичный интервал) для участка $[-\frac{L}{2}, \epsilon] \cup [\epsilon, \frac{L}{2}]$ и недостаточной точностью для интервала $[\epsilon, \epsilon]$, где ϵ -малая величина, следует использовать неравномерное разбиение отрезка L , такое что число точек возрастает при приближении к 0.
- Оптимизировать программу для повышения скорости работы (использовать параллельные вычисления, выбрать другой язык программирования).

Это позволит получить более точные результаты и выяснить сходятся ли численные результаты при дальнейшем стремлении параметра регуляризации β к 0 и стремлении параметра регуляризации L к ∞ .

Список литературы

- [1] Suprit Singh and T. Padmanabhan "Complex Effective Path: A Semi-Classical Probe of Quantum Effects" [\[arXiv:1112.6279v1\]](https://arxiv.org/abs/1112.6279v1) [hep-th]
- [2] A. M. Perelomov Generalized Coherent States and Their Applications [\[ISBN-13\] \[978-3540159124\]](https://www.amazon.com/Generalized-Coherent-States-Applications/dp/0305015912)
- [3] I.V. Tyutin, B.L. Voronov Generalized oscillator representations for Calogero Hamiltonians [\[arXiv:1211.6331\]](https://arxiv.org/abs/1211.6331) [math-ph]
- [4] D.M. Gitman, I.V. Tyutin, B.L. Voronov Self-adjoint extensions and spectral analysis in Calogero problem [\[arXiv:0903.5277\]](https://arxiv.org/abs/0903.5277) [quant-ph]
- [5] D.M. Gitman, I.V. Tyutin, B.L. Voronov Large Oscillator representations for self-adjoint Calogero Hamiltonians [\[arXiv:0903.5277\]](https://arxiv.org/abs/0903.5277) [quant-ph]
- [6] Steven Weinberg Gravitation and Cosmology [\[ISBN-13\]\[978-0471925675\]](https://www.amazon.com/Gravitation-Cosmology-13/dp/0471925675)
- [7] В.В.Киселёв Квантовая механика Курс лекций Кванты [\[Киселев.В.В\]](https://www.kislev.ru)
- [8] С. И. Виницкий, И. В. Пузынин, А. В. Селин. Численное решение нестационарного уравнения Шредингера с повышенной точностью [\[rsl.ru\]](https://rsl.ru)

9 Приложение

```
import numpy as np
from scipy.linalg import inv
import matplotlib.pyplot as plt
import cmath

AccuracyOfSplitting = 200 #Number Of Nodes Per Unit Interval
LengthOfHole = 10.0 # Length Of Hole (Must be greater than 10)
Mass = 1.0 # Mass Of a Particle
M_for_a=10 # M Comparison With Black Hole Temperature
w_for_a=10# w Comparison With Black Hole Temperature
a =2*M_for_a*M_for_a*w_for_a*w_for_a # Coefficient before -1/x^2
DeltaT=1e-3 # Time Step
Correction_For_Potential = 1.0e-20 #Regularization Parametr For Potential
Correction_For_Wave_Function=0.01 # Shift Initial Wave Function To The Right

NumberOfNodes = int(AccuracyOfSplitting * LengthOfHole) + 1 #Calculating ->
#The Number Of Nodes For Splitting a Segment Into Nodes
NumberOfTimeNodes = NumberOfNodes # (This Equality Does Not Carry Any Sense)->
#You Can Choose Any Number Of Time Nodes For Calculation

DeltaX = 1 / float(AccuracyOfSplitting) # Space Step

n1 = NumberOfNodes # Does Not Mean Anything n1 Is Just Shorter

Potential_X = np.zeros(n1) # Array Creation
Potential_Y = np.zeros(n1) # Array Creation

for i1 in range(n1):
    Potential_X[i1] = -LengthOfHole / 2 + i1 / float(AccuracyOfSplitting)
# From NowOn It Just Means X Coordinate Not Only For Potential But ->
#For The Whole Programm

for i1 in range(n1):
    Potential_Y[i1] = -a / ((Potential_X[i1] * Potential_X[i1]) + \
    Correction_For_Potential)
    # Y Coordinate For Potential
    #Potential_Y[i1] = Mass*w**2*(Potential_X[i1]**2)*0.5
    # Y Coordinate For Potential (For Comparison With Theory)

mainDiag = np.zeros(n1) # Array Creation
subDiag = np.zeros(n1 - 1) # Array Creation

for i in range(n1):
    mainDiag[i] = (1 / (DeltaX * DeltaX)) + Potential_Y[i] # Creation ->
#The Main Diagonal Of The Hamiltonian

for i in range(n1 - 1):
    subDiag[i] = (-1 / (DeltaX * DeltaX * 2)) # Creation The Subdiagonal Of
#The Hamiltonian
```

```

H = np.zeros((n1, n1)) # 2D Array Creation For Hamiltonian

np.fill_diagonal(H, mainDiag) # Filling In The Main Diagonal Of The Hamiltonian
np.fill_diagonal(H[1:], subDiag) # Filling In The Subdiagonal Of The Hamiltonian
np.fill_diagonal(H[:, 1:], subDiag) # Filling In The Subdiagonal Of The Hamiltonian

Correction_For_Wave_Function_arr = np.ones(n1) * Correction_For_Wave_Function # ->
#Shift Initial Wave Function To The Right

# Next Two Lines For Comparison With Harmonic Oscillator
#psi0_no = np.zeros(len(Potential_X))
#psi0_no = (((Mass*w/(np.pi*1))**0.25)*np.exp(-0.5*Mass*w*Potential_X**2) + np.sqrt
#((1/2))*((Mass*w/(np.pi*1))**0.25)*np.exp(-0.5*Mass*w*Potential_X**2)*2*Potential_X)
#/np.sqrt(2)

psi0_no = np.exp(-10*(Potential_X-Correction_For_Wave_Function_arr)**2/2)
# Unnormolized Wave Function

Norma = 0.0 #Initial Norma Value

for m in range(0,NumberOfNodes-1):
    Norma+= psi0_no[m]**2 *DeltaX # Norma Calculation

#print(Norma)

psi0 =psi0_no /np.sqrt(Norma) # Normalization

psi = np.zeros([NumberOfTimeNodes,NumberOfNodes]) # 2D Array Creation ->
#For Wave Functions In Different Time Periods
psi = psi.astype(complex) # complex type for 2D Arrray
psi[0] = psi0 # Setting Initial Wave Function (t=0)

HHH=(inv(np.identity(NumberOfNodes)+(1j*DeltaT/2)*H))@np.identity(NumberOfNodes)-\
(1j*DeltaT/2)*H # The Crank-Nicolson method
for i in range(0, NumberOfTimeNodes-1):
    psi[i+1,:] = HHH@psi[i,:]
    #Calculating Next Wave Function Using Crank-Nikolson

#arg=[cmath.phase(psi[i][int(NumberOfNodes/2)+3]) for i in range(NumberOfNodes)]#->
#Rudiment

X_2=np.zeros(NumberOfTimeNodes) # abs(X) To The Power Of Two Array Creation
X=np.zeros(NumberOfTimeNodes) # X To The Power Of Two Array Creation
for i in range(0, NumberOfTimeNodes-1):
    for m in range(0,NumberOfNodes-1):
        X[i]+= ((( -LengthOfHole / 2 + m / float(AccuracyOfSplitting))) * \
        (((psi[i][m]).conjugate())*psi[i][m])*DeltaX).real
    # Calculating X Average

X_2=abs(X)**2 # abs(X) To The Power Of Two Array Calculation
DX_2=np.zeros(NumberOfTimeNodes) # Derivative Of abs(X) To The Power Of Two ->
#Array Creation

```

```

for i in range(0, NumberOfTimeNodes-1):
    DX_2[i] = (X_2[i+1]-X_2[i])/DeltaT # Derivative Of abs(X) To The Power Of ->
# Two ArrayCalculation
Medium_DX_2 = 0.0

for i in range(0, NumberOfTimeNodes-10): # -10 Is The Crutch For Graphs
    Medium_DX_2+= DX_2[i]* i* DeltaT

Medium_DX_2=Medium_DX_2/(NumberOfTimeNodes-10*DeltaT) #Medium Of Derivative ->
# Of abs(X) To The Power Of Two Array Calculation

#Next two lines Are For Plots (With Some Initial Parametrs Works Fist ->
# line With Others Works Second Line)
Time = np.arange(0, 0 + DeltaT *NumberOfNodes, DeltaT)
#Time = np.arange(0, 0 + DeltaT * NumberOfTimeNodes, DeltaT)

# PLOT Creation (If You Are Using Something Other Than Jupyter Make dpi Less)
fig, axs = plt.subplots(4, 2, figsize=(21.2132, 15), dpi=500)

axs[0, 0].plot(Time[:-2], X[:-2])
axs[0, 0].set_xlabel('$t$')
axs[0, 0].set_ylabel('$X$')
axs[0, 0].legend(["График зависимости $X$ от $t$ "], fontsize=10, \
loc=(0.5, 1.01))

axs[0, 1].plot(Time[:-2], X_2[:-2])
axs[0, 1].set_xlabel('$t$')
axs[0, 1].set_ylabel('$|X|^2$')
axs[0, 1].legend(["График зависимости $|X|^2$ от $t$ "], fontsize=10, \
loc=(0.5, 1.01))

axs[1, 1].plot(Time[:-2], DX_2[:-2])
axs[1, 1].set_xlabel('$t$')
axs[1, 1].set_ylabel('$d|X|^2/dt$')
axs[1, 1].legend(['График зависимости $d|X|^2/dt$ от $t$, < $d|X|^2/dt$ > $ = ' + str \
(Medium_DX_2)], fontsize=10, loc=(0.1, 1.01))

axs[1, 0].plot(Potential_X, Potential_Y)
axs[1, 0].set_xlabel('$x$')
axs[1, 0].set_ylabel('$V(x)$')
axs[1, 0].legend(["График потенциала $V$"], fontsize=10, loc=(0.1, 1.01))

axs[2, 0].plot(Potential_X, psi0)
axs[2, 0].set_xlabel('$x$')
axs[2, 0].set_ylabel('$\psi(0)$')
axs[2, 0].legend(["График $\psi(0)$ - волновая функция в момент времени $t = 0$"], \
fontsize=10, loc=(0.1, 1.01))

axs[2, 1].plot(Potential_X, psi[int(NumberOfTimeNodes/3)]* \
(psi[int(NumberOfTimeNodes/3)].conjugate()))
axs[2, 1].set_xlabel('$x$')

```

```

axs[2, 1].set_ylabel('$\psi(' + str(int(NumberOfTimeNodes/3)*DeltaT) +
+'$)' + '$*\psi ~{\dag}(' + str(int(NumberOfTimeNodes/3)*DeltaT) + '$)' )
axs[2, 1].legend(['График модуля квадрата $\psi(' +
str(int(NumberOfTimeNodes/3)*DeltaT) + '$)' +
'$ - волновая функция в момент времени $t = $' +
str(int(NumberOfTimeNodes/3)*DeltaT)], ,
fontsize=10, loc=(0.1, 1.01))

axs[3, 0].plot(Potential_X, psi[int(NumberOfTimeNodes*(2/3))] * \
(psi[int(NumberOfTimeNodes*(2/3))].conjugate()))
axs[3, 0].set_xlabel('$x$')
axs[3, 0].set_ylabel('$\psi(' + str(int(NumberOfTimeNodes *
(2/3))*DeltaT) + '$)' + '$*\psi ~{\dag}(' + str(int(NumberOfTimeNodes *
(2/3))*DeltaT) + '$)' )
axs[3, 0].legend(['График модуля квадрата $\psi(' +
str(int(NumberOfTimeNodes*(2/3))*DeltaT) +
'$)' - волновая функция в момент времени $t = $' +
str(int(NumberOfTimeNodes*(2/3))*DeltaT)], fontsize=10, loc=(0.1, 1.01))

axs[3, 1].plot(Potential_X, psi[int(NumberOfTimeNodes-10)] * \
(psi[int(NumberOfTimeNodes-10)].conjugate()))
axs[3, 1].set_xlabel('$x$')
axs[3, 1].set_ylabel('$\psi(' + str(round(float((NumberOfTimeNodes-10) *
DeltaT), 4)) + '$)' + '$*\psi ~{\dag}(' + str(round(float((NumberOfTimeNodes-10) *
DeltaT), 4)) + '$)' )
axs[3, 1].legend(['График модуля квадрата $\psi(' +
str(round(float((NumberOfTimeNodes-10) *
DeltaT), 4)) +
'$)' - волновая функция в момент времени $t = $' +
str(round(float((NumberOfTimeNodes-10) *
DeltaT), 4))] ,
fontsize=10, loc=(0.1, 1.01))

fig.suptitle('Параметры: $\omega =' + str(w_for_a) + \
' $, M =' + str(M_for_a) + ', LengthOfHole' +
=' ' + str(LengthOfHole) + ', NodesPerUnitInterval=' +
str(AccuracyOfSplitting) + ', Mass=' + str(Mass) +
', CorrerectionForPotential=' +
str(Correction_For_Potential) + ', DeltaT=' + str(DeltaT) +
', CorrectionForWaveFunction=' +
str(Correction_For_Wave_Function), fontsize=13)

plt.tight_layout()
plt.show()

# Программа может не компилироваться из-за отсутствия отступов ->
#после "for" после копирования

```

Выше приведен код для программы 5.2.2.