

Numerisk lösning av den tidsberoende Schrödingerekvationen

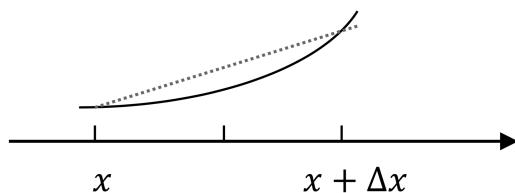
Det är enbart i de enklaste fallen – t.ex. när potentialen är sträckvis konstant – som vi kan lösa Schrödingerekvationen analytiskt. I andra fall får vi använda datorn för att bestämma vågfunktionen. Eftersom det är mycket svårt att representera analytiska funktioner i en dator räknar vi då istället ut vågfunktionens värde enbart i vissa diskreta punkter. Normalt ligger dessa med konstant avstånd från varandra. Om de punkter där vågfunktionen beräknas kallas x_i , $i = 0, 1, 2, 3, \dots, n$ så gäller det att $x_i = x_0 + i \cdot \Delta x$. Δx är alltså avståndet mellan de diskreta x -värdena. Hur Δx ska väljas får avgöras från fall till fall. Ska man t.ex. representera en våg med en diskret lösning måste man välja Δx betydligt mindre än våglängden.

Vågfunktionen kan t.ex. representeras av en vektor i MATLAB genom att låta elementen i vektorn som beskriver funktionen $f(x)$ vara $f_i = f(x_i)$, d.v.s. $[f(x_1), f(x_2), f(x_3), \dots]$.

För att numeriskt beräkna derivator av diskretiserade funktioner använder man sig av approximativa uttryck. Som bekant definieras derivatan genom $\frac{df}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$. För den numeriska lösningen kan följande uttryck användas:

$$\frac{df}{dx} \approx \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x}. \quad (1)$$

Man får då ett approximativt uttryck för derivatan i punkten $x_i + \Delta x/2$. Approximationen för derivatan blir naturligtvis bättre ju mindre Δx är då $f(x)$ bör kunna approximeras med en rät linje mellan två närliggande x -punkter för att få bra resultat.



Figur 1: Approximativ derivata (streckad linje) i punkten $x + \Delta x/2$.

Den streckade linjens lutning i figur 1 ger en approximation till derivatan i mittpunkten. En approximation till andraderivatan i punkten ges av

$$\frac{d^2 f}{dx^2} \approx \frac{f'(x_i + \frac{\Delta x}{2}) - f'(x_i - \frac{\Delta x}{2})}{\Delta x} \approx \frac{\frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} - \frac{f_i - f_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{(\Delta x)^2}. \quad (2)$$

Nu byter vi fokus till Schrödingerekvationen och hur vi kan använda informationen ovan för att lösa den. Schrödingerekvationen lyder

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi}{dx^2} + V(x)\phi = E\phi, \quad (3)$$

som kan skrivas om som $\frac{d^2 \phi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E)\phi$.

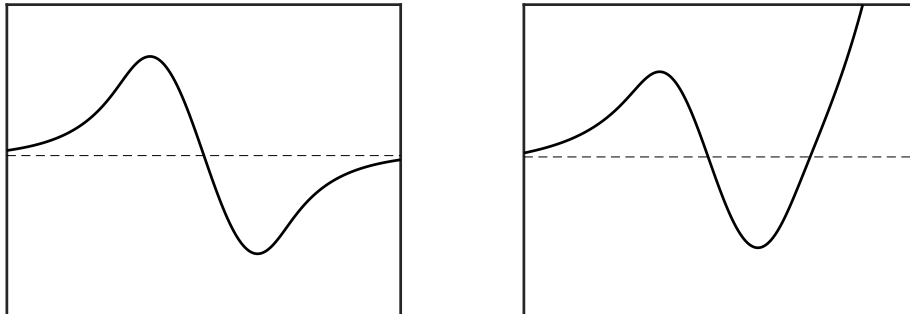
Använder vi nu uttrycken för diskretisering av en funktion samt andraderivatan får vi, efter lite omskrivningar,

$$\phi_{i+1} = 2\phi_i - \phi_{i-1} + (\Delta x)^2 \cdot \frac{2m}{\hbar^2} (V(x_i) - E) \phi_i. \quad (4)$$

Övning: Gå igenom detaljerna i härledningen.

Som vi ser av denna ekvation kan vi räkna ut vågfunktionen i punkten x_{i+1} om vi känner den i de båda "tidigare" punkterna x_i och x_{i-1} . Metoden fungerar på så sätt att man startar med två värden "längst till vänster" på x -axeln och sedan stegar sig fram ett steg i taget. De två första punkterna kan man beräkna t.ex. genom att potentialen är approximativt konstant (ofta = 0) för tillräckligt små x .

Men hur bestämmer man energin E ? Som du läst i kursboken är det normeringsvillkoret som bestämmer de möjliga energivärdena. Det är endast för dessa speciella värden på E som vågfunktionen går mot noll då $x \rightarrow \infty$. Det enklaste tillvägagångssättet för att finna dessa energier är att beräkna vågfunktionen för olika värden på E och se vilka som uppfyller normeringsvillkoret, se figur 2. Start sker "långt till vänster" med en vågfunktion som går mot 0 då $x \rightarrow \infty$.



Figur 2: Vågfunktion som uppfyller (vänster) samt inte uppfyller (höger) normeringsvillkoret.

Projektet går ut på att:

- Skriva en kod i MATLAB som beräknar vågfunktionen och energivärdena.
- Göra beräkningar på ett fysikaliskt exempel som väljs i samråd med din handledare.