

# Sprawozdanie

## Rozwiązywanie równania Schrödingera 1D metodą ewolucji w czasie urojonym

Amadeusz Filipek

Laboratorium komputerowe WfiIS AGH

Celem ćwiczenia jest numeryczne rozwiązanie równania Schroedingera dla potencjału oscylatora harmonicznego przy wykorzystaniu metody ewolucji w czasie urojonym.

Jeżeli Hamiltonian układu niezależny od czasu to równanie Shroedingera zależne od czasu posiada rozwiązanie postaci :

$$\varphi(x, t) = \sum_n C_N e^{-i \frac{E_n}{\hbar} t} \varphi_n(x)$$

gdzie  $E_n$  to wartości własne Hamiltonianu a  $\varphi_n$  to funkcje własne odpowiadające wartościom własnym. Jeśli dokonamy podstawienia :

$$\tau = it$$

Otrzymamy :

$$\varphi(x, t) = \sum_n C_N e^{-\frac{E_n}{\hbar} \tau} \varphi_n(x)$$

W rozwiązaniu pojawia się eksponenta, która maleje szybciej dla wyższych wartości energii. Metoda ewolucji czasu urojonego polega na iteracji w czasie urojonym  $\tau$  do momentu w którym w powyższej sumie funkcje falowe wyższych stanów zostaną wytłumione i otrzymamy w rozwiązaniu stan podstawowy. Stany wyższe otrzymamy odejmując od sumy znaleziony przez nas stan podstawowy i iterując w ten sam sposób. Numeryczne rozwiązanie sprowadza się do następującego algorytmu :

1. Wychodzimy od dowolnej funkcji falowej ( może być wygenerowana losowo )
2. Dokonujemy normalizacji funkcji falowej ( metoda nie zachowuje normy zatem normalizować trzeba po każdej iteracji )
3. Wyznaczamy wartość energii własnej na podstawie funkcji falowej ze wzoru :

$$E_n = \int \varphi_n^*(x) H \varphi_n(x) dx$$

4. Wyznaczamy funkcję falową w następnym kroku iteracji korzystając ze wzoru :

$$\varphi_{n+1}(x) = \varphi_n(x) - \alpha H \varphi_n(x) -$$

gdzie  $\alpha$  jest parametrem, który należy odpowiednio dobrać tak aby metoda była zbieżna a zarazem obliczenia nie trwały zbyt długo.

5. Sprawdzamy czy wyznaczona wartość energii w iteracji zmieniła się od wartości w poprzedniej iteracji zadaną dokładnością tzn. :

$$|E_{n+1} - E_n| < \epsilon$$

Jeśli tak to wracamy do punktu 2. i kontynuujemy iteracje.

Powyższy algorytm pozwala wyznaczyć stan podstawowy. Aby wyznaczyć wyższe stany do algorytmu musimy dodać ortogonalizację Grama-Schmidta. Co krok iteracji od funkcji falowej odejmujemy wszystkie rzuty funkcji na poprzednie stany :

$$\varphi_n^k(x) = \varphi_n^k(x) - \sum_{i=0}^{i < k-1} \left( \varphi^i(x) \varphi_n^k(x) \right) \varphi^i(x)$$

### Cząstka w potencjale oscylatora harmonicznego

W ćwiczeniu rozpatrujemy cząstkę znajdującą się w potencjale harmonicznym postaci :

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

W obliczeniach przyjmuję jednostki pomocnicze w postaci długości charakterystycznej  $a$  oraz jednostki energii równej  $\hbar\omega$ , gdzie :

$$a = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

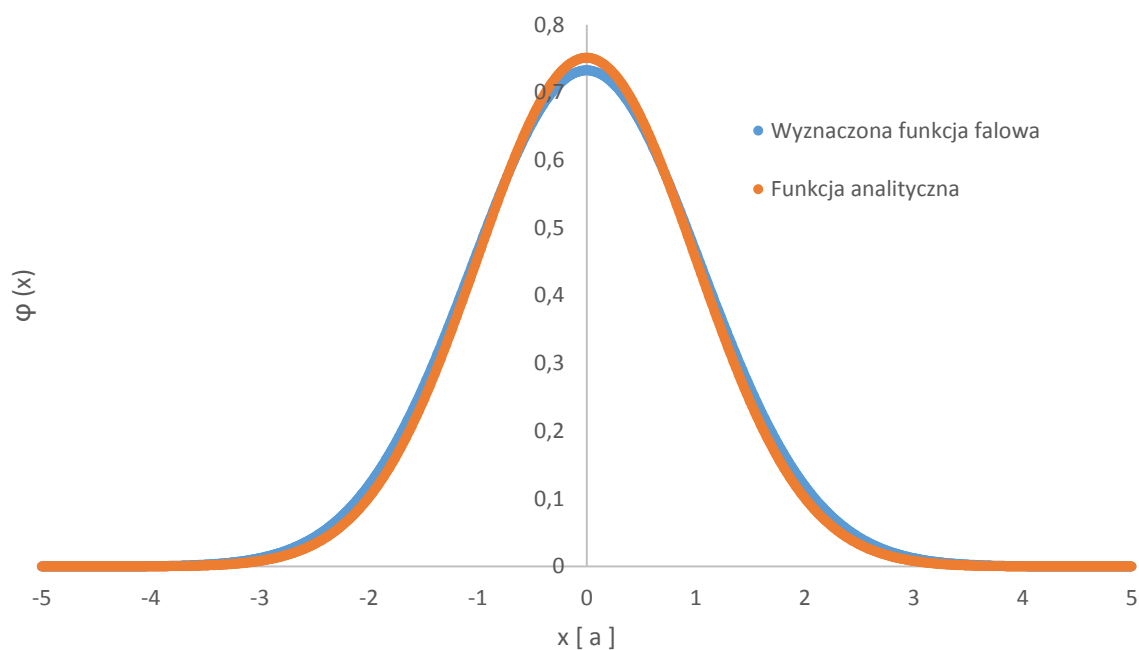
Wtedy Hamiltonian układu przyjmuje postać bezwymiarową. Dyskretnie przybliżenie trójkątowe działania Hamiltonianu na funkcję falową przyjmuje postać :

$$H\varphi_n(x) = -\frac{1}{2dx^2} (\varphi_n(x+dx) - 2\varphi_n(x) + \varphi_n(x-dx)) + \frac{1}{2} x^2 \varphi_n(x)$$

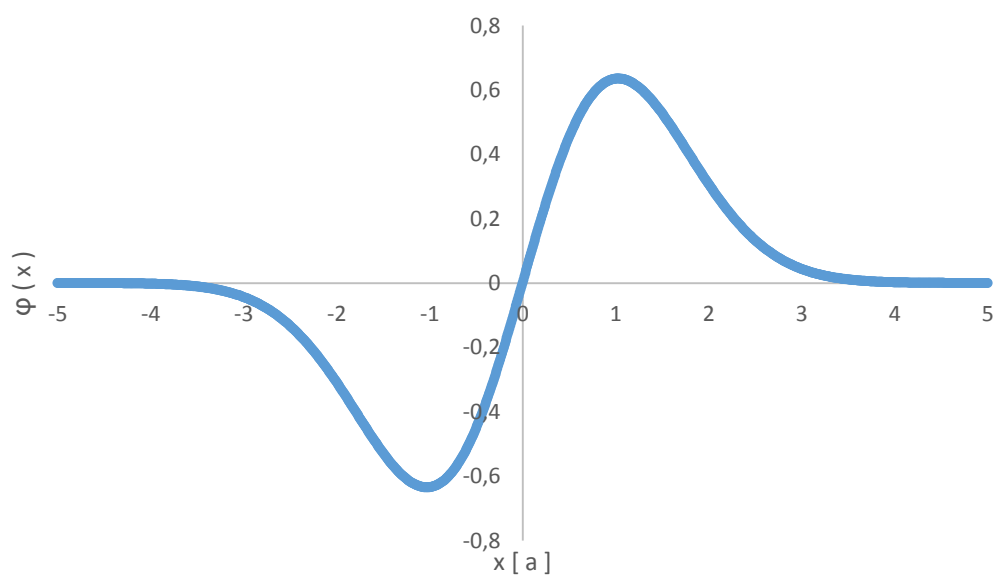
Gdzie  $dx$  jest krokiem siatki. Powyższe równanie wykorzystuję w punkcie 3. oraz 4. algorytmu. Obliczenia przeprowadziłem w pulce obliczeniowym o wymiarach od -5 do 5 długości charakterystycznych  $a$ . Przedział podzieliłem na 1001 węzłów z krokiem  $dx = 0.01$ . Zerowanie zmian energii w punkcie 5. algorytmu zadałem z dokładnością do  $10^{-7}$ . Wartości wyznaczonych poziomów energii porównałem z wartościami teoretycznymi, które wynoszą  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ . Wyznaczony pierwszy poziom energetyczny porównałem z funkcją analityczną w postaci funkcji Gaussa.

Tabela 1. Zestawienie wartości pierwszych dwóch poziomów energetycznych

Wyznaczone [ $\hbar\omega$ ]	Teoretyczne [ $\hbar\omega$ ]	Błąd względny [ % ]
0.5025	0.5	0.49
1.5048	1.5	0.32



Wykres 1. Funkcja falowa poziomu podstawowego na tle funkcji analitycznej



Wykres 2. Funkcja falowa pierwszego poziomu wzbudzonego

Wyznaczona pierwsza funkcja falowa nieznacznie odbiega od krzywej teoretycznej, może to być spowodowane pudłem obliczeniowym, funkcja teoretyczna zanika w nieskończoności, natomiast wyznaczona zeruje się na ścianach pudła. Aby zwiększyć dokładność obliczeń należałoby zwiększyć dokładność zerowania warunku oraz rozszerzyć pudło obliczeniowe.