Sprawozdanie

Rozwiązywanie niezależnego of czasu równania Schrödingera (RS) 1D metodą Numerova z zastosowaniem metody strzałów

Amadeusz Filipek

Laboratorium komputerowe WFiIS AGH

Celem ćwiczenia jest numeryczne rozwiązanie niezależnego od czasu równania Schroedingera metodą Numerova dla nieskończonej studni potencjału i porównanie wyników numerycznych z rozwiązaniem analitycznym a następnie rozwiązanie równania dla potencjału w postaci gausianu.

Równanie Schroedingera stanowi problem własny. Problem własny polega na wyznaczeniu zarówno wartości własnej (energii) oraz funkcji falowej odpowiadającej tej wartości. W równaniu mamy zatem dwie niewiadome. Metoda Numerova pozwala nam iteracyjnie wyznaczyć funkcję falową znając wartości początkowe od których startujemy obliczenia. Musimy jednak znać wartość energii dla której wyznaczamy funkcję falową. Funkcja falowa musi spełniać określone warunki. Dla nieskończonej bariery potencjału jest to zerowanie się funkcji na brzegach. W celu wyznaczenia energii własnych możemy zastosować metodę strzałów. Polega ona przemiataniu kolejnych energii, wyznaczaniu odpowiadającym im funkcji falowych i sprawdzaniu czy funkcje falowe spełniają założenia z zadaną przez nas dokładnością.

Nieskończona studnia potencjału

W pierwszym etapie ćwiczenia rozpatrujemy cząstkę uwięzioną w nieskończonej studni potencjału. W celu wyznaczenia poziomów energetycznych, wykorzystuję podstawową metodę strzałów. Poniżej prezentuję wyniki moich obliczeń. Rozpatrywaną szerokość studni równą 5 nm podzieliłem na 500 kroków o długości $\Delta x = 0{,}01$. Dokładność zerowania funkcji falowej zadałem z dokładnością do $1 \cdot 10^{-8}$. Wartości analityczne energii wyznaczyłem ze wzoru :

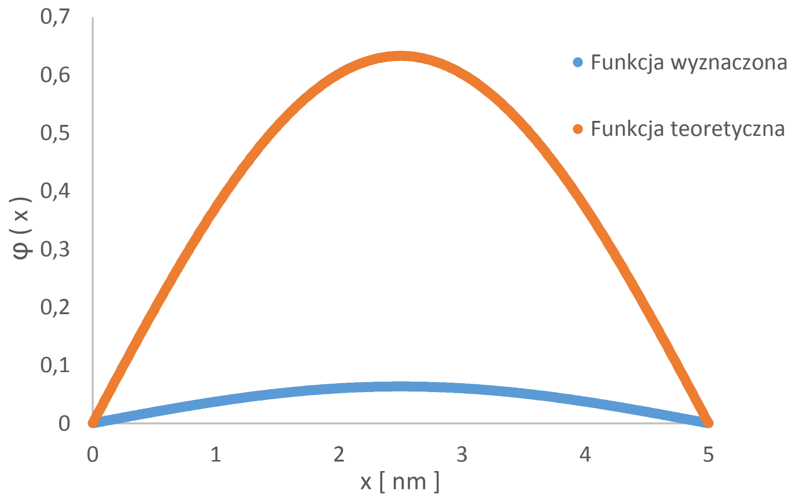
$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2 m_e L^2}$$

Tabela 1. Wyznaczone poziomy energetyczne zestawione z wartościami teoretycznymi

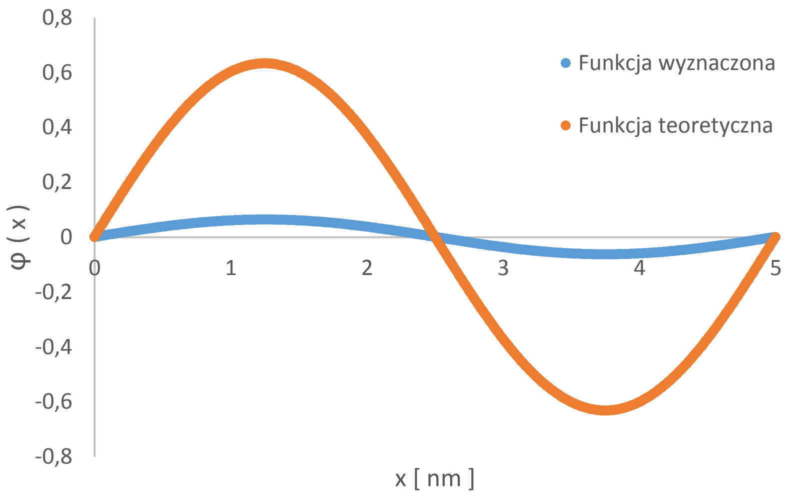
Energie wyznaczone [eV]	Energie przewidywane [eV]	Błąd względny [%]
0.0152	0.0150	1.1
0.0608	0.0602	1.1
0.1369	0.1354	1.1
0.2433	0.2407	1.1

Dla trzech pierwszych poziomów energetycznych porównałem wyznaczone i unormowane funkcje falowe z wynikami analitycznymi. Funkcje wyznaczone różnią się od rozwiązań analitycznych o czynnik skalujący. Moduł kwadratu funkcji falowej stanowi ciągły rozkład gęstości prawdopodobieństwa, podczas gdy numerycznie wyznaczamy jedynie wartości funkcji falowej w punktach siatki obliczeniowej. Sytuacja ta jest analogiczna do tworzenia histogramu. Rozwiązania analityczne funkcji falowej mają postać :

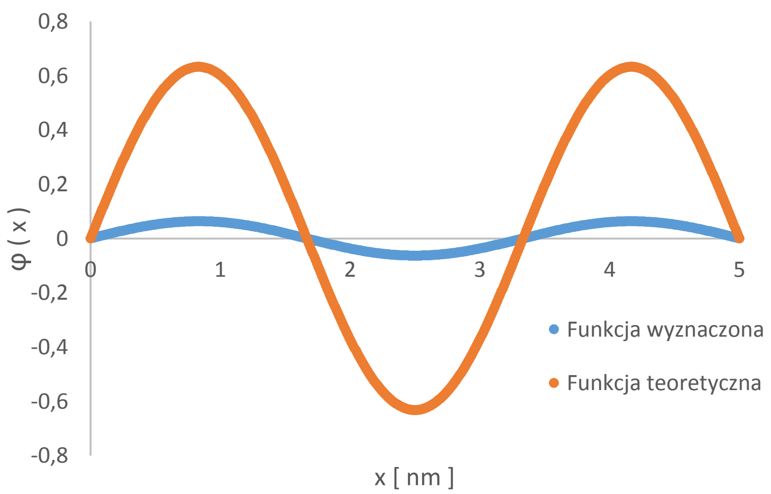
$$\varphi_n(x) = \sqrt{2/L} \cdot \sin(\frac{n\pi}{L} x)$$



Wykres 1. Wyznaczona funkcja falowa pierwszego poziomu energetycznego na tle teoretycznej



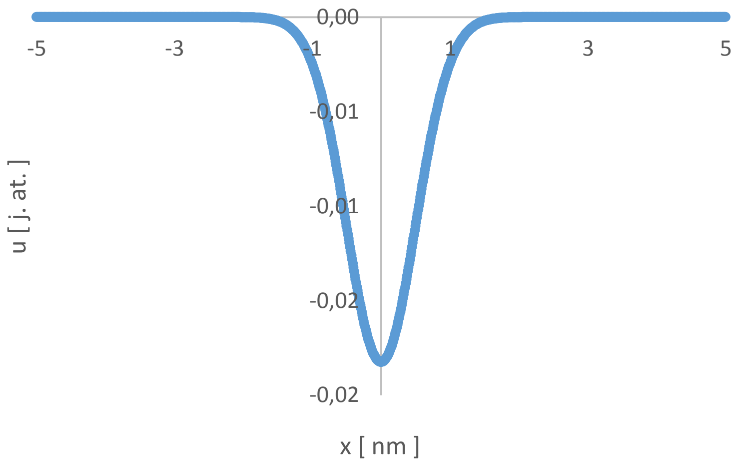
Wykres 2. Wyznaczona funkcja falowa drugiego poziomu energetycznego na tle teoretycznej



Wykres 3. Wyznaczona funkcja falowa trzeciego poziomu energetycznego na tle teoretycznej

Potencjał postaci Gaussa

W drugim etapie ćwiczenia rozpatrujemy cząstkę w potencjale o postaci Gaussowskiej.



Wykres 4. Wykres funkcji potencjału

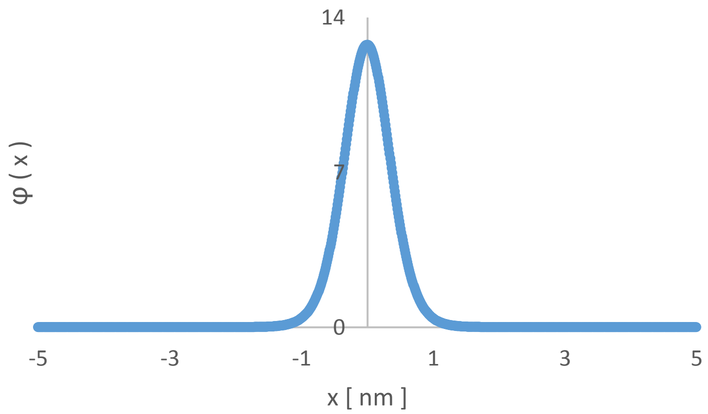
W celu wyznaczenia pierwszego poziomu energetycznego, który jest stanem związanym o ujemnej energii, należy zmodyfikować metodę strzałów. Warunki brzegowe zadajemy odpowiednie dla nieskończonej bariery potencjału po to aby obliczenia zawęzić do skończonego obszaru (pudła obliczeniowego). Pudło musi być na tyle duże aby nie zaburzać rozwiązań. W obliczeniach przyjąłem obszar od -5 do +5 nm. Funkcje falowe dla zadanej energii wyznaczamy za pomocą metody Numerova, jednakże wyznaczamy osobno funkcję falową zaczynając od początku oraz tą samą funkcję wyznaczamy od końca. W zadanym punkcie sklejamy oba rozwiązania. Jedno z rozwiązań skalujemy tak aby wartości obu funkcji w punkcie sklejenia były równe. Energia jest wartością własną jeśli wyznaczona w ten sposób funkcja falowa spełnia warunek ciągłości. Jako punkt sklejenia funkcji przyjąłem $\bar{x} = -0.05\, nm$. Warunek ciągłości sprawdzałem za pomocą wyrażenia pomocniczego wykorzystującego dwupunktową aproksymację pochodnej :

$$\chi = \frac{1}{\varphi(\bar{x})}[\varphi_L(\bar{x} - \Delta x) - \varphi_P(\bar{x} - \Delta x)]$$

Funkcja falowa spełnia warunek ciągłości jeśli $\chi = 0$. Zerowanie χ zadałem z dokładnością do $1 \cdot 10^{-7}$. Wyznaczona w ten sposób energia poziomu podstawowego wynosi :

$$E_1 = -0{,}333\ eV$$

Wykres unormowanej funkcji falowej odpowiadającej tej wielkości wygląda następująco :



Wykres 5. Wykres funkcji falowej poziomu podstawowego