Univerza *v Ljubljani*
Fakulteta za *matematiko in fiziko*

Naloga 7: Robni problem lastnih vrednosti

Matematično-fizikalni praktikum

Dimitrije Pešić
Vpisna številka: 28201072

Predavatelj: prof. dr. Borut Paul Krševan

Ljubljana, 14.12.2023

1 Uvod

Naloga je od nas zahtevala, da preizkusimo uporabiti čim več metod za izračun nihanja matematičnega nihala z začetnim pogojem $\vartheta(0) = \vartheta_0 = 1, \dot{\vartheta}(0) = 0$. Poiskati smo morali korak, ki zadošča za natančnost na 3 mesta. Za razliko od prejšnje naloge smo se tu dodatno seznanili z tako imenovanimi *simplektičnimi* metodami.

Naloga je od nas zahtevala, da določimo nekaj najnižjih lastnih funkcij in lastnih vrednosti za neskončno potencialno jamo z diferenčno metodo in metodo streljanja. Zanimalo nas je tudikaj ima pri diferenčni metodi večjo vlogo pri napaki: končna natančnost diference, s katero aproksimiramo drugi odvod, ali zrnatost intervala (končna razsežnost matrike, ki jo diagonaliziramo)?

2 Ozadje

Pri robnem problemu lastnih vrednosti poznamo diferencialno enačbo in nekaj robnih pogojev (običajno vsaj toliko, kolikor je red enačbe) Za rešitev problema moramo v splošnem v enem zamahu določiti tako (lastne) funkcije, ki ustrezajo danim robnim pogojem, kot (lastne) vrednosti, ki skupaj zadoščajo diferencialni enačbi. Reševanje robnih problemov je zato lahko bistveno bolj zapleteno kot integracija začetnih problemov.

Numerično bomo reševali stacionarno Schrödingerjevo enačbo

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

za neskončno potencialno jamo ($V(-a/2 < x < a/2) = 0$ in $V(|x| \geq a/2) \to \infty$) ter za končno potencialno jamo ($V(|x| \geq a/2) = V_0$), za kateri poznamo analitične rešitve; glej Strnad, *Fizika II*. Dva značilna pristopa, diferenčna metoda in strelska metoda, nas bosta pripravila na resnejše probleme, za katere analitičnih rešitev ne poznamo.

Pri *diferenčni metodi* razdelimo interval $[-a/2, a/2]$ na N točk ($x_i = -a/2 + ia/N$) in prepišemo drugi krajevni odvod v drugo diferenco, tako da ima brezdimenzijska enačba obliko

$$\frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{h^2} + E\psi_i = 0$$

oziroma

$$\psi_{i-1} - (2-\lambda)\psi_i + \psi_{i+1} = 0\,,$$

kjer je $\lambda = Eh^2 = k^2h^2$. Diskretizirati je treba tudi robna pogoja pri $x = -a/2$ in $x = a/2$, ki sta v splošnem (in tudi pri končni jami) mešanega tipa,

$$\begin{aligned} c_1\psi_0 + c_2\frac{\psi_1 - \psi_{-1}}{2h} &= 0\,, \\ d_1\psi_N + d_2\frac{\psi_{N+1} - \psi_{N-1}}{2h} &= 0\,, \end{aligned}$$

medtem ko sta pri neskončni jami preprostejša, $\psi_0 = \psi_N = 0$. V primerih potencialnih jam tako dobimo tridiagonalni sistem N oziroma $N-1$ linearnih enačb

$$A\underline{\psi} = \lambda\underline{\psi}$$

za lastne vektorje $\underline{\psi}$ in lastne vrednosti λ, ki ga rešujemo z diagonalizacijo.

Pri *strelski metodi* začnemo s "kosinusnim" začetnim pogojem v izhodišču $\psi(0) = 1$, $\psi'(0) = 0$ ali "sinusnim" pogojem $\psi(0) = 0$, $\psi'(0) = 1$, nato pa z nekim izbranim E diferencialno enačbo s poljubno integracijsko shemo (npr. RK4) integriramo do roba $x = a/2$ in tam preverimo, ali je izpolnjen drugi robni pogoj, $\psi(a/2) = 0$. Vrednost E spreminjamo tako dolgo, dokler robni pogoj ni izpolnjen do zahtevane natančnosti, in tako dobimo sode in lihe rešitve enačbe skupaj z ustreznimi lastnimi vrednostmi energije.

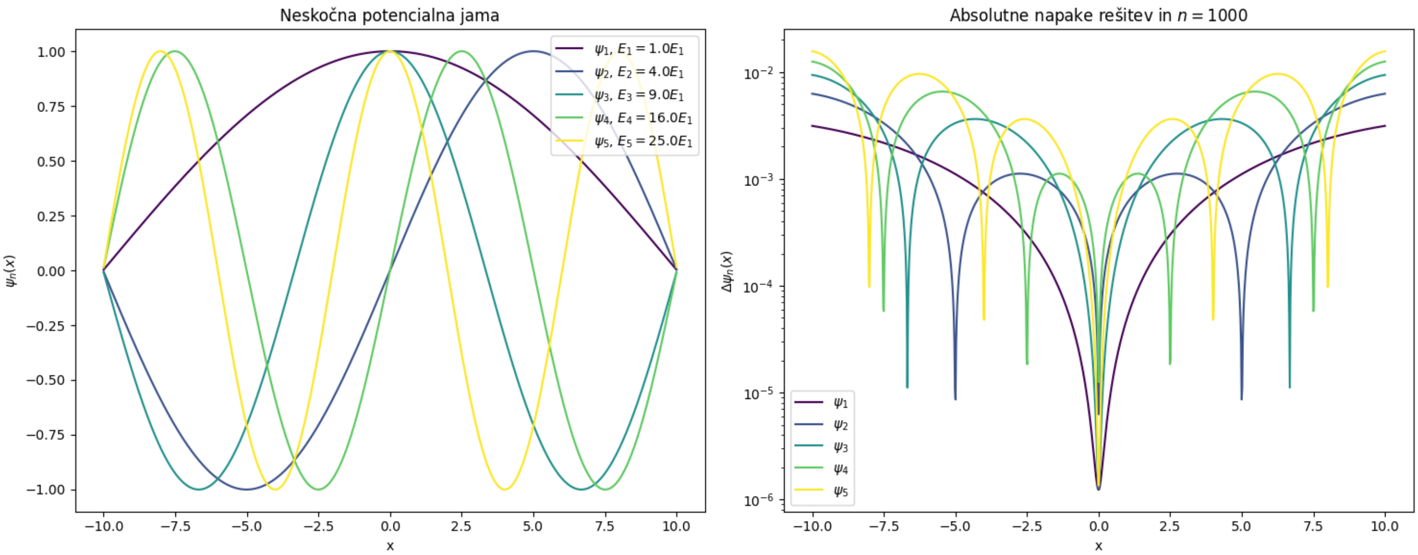
3 Diferenčna metoda

Implementacije sem se zopet lotil v pythonu. Tokrat sem imel težave z uporabo priloženih funkcij, zato sem moral implementirati diferenčno metodo sam. Uporabil sem vgrajeno funkcijo *numpy.linalg.eigh*, lahko bi matrike diagoniliziral z uporabo metod in znanja iz tretje naloge, vendar se mi je to zdelo zamudno in prepočasno za namene trenutne naloge.

Na sliki 1 so prikazane prvih 5 lastnih funkcij izračunanih z diferenčno metodo, zraven pa še njihovo odstopanje od analitičnih rešitev za katere vemo da velja:

$$\psi_k(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos\left(\frac{k\pi x}{a}\right) ; \qquad k = 0, 2, 4, \dots$$
$$\psi_k(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right) ; \qquad k = 1, 3, 5, \dots \tag{1}$$

Opazno je simetričnost napake, kar je pričakovano, saj gre za simetrilne funkcije.



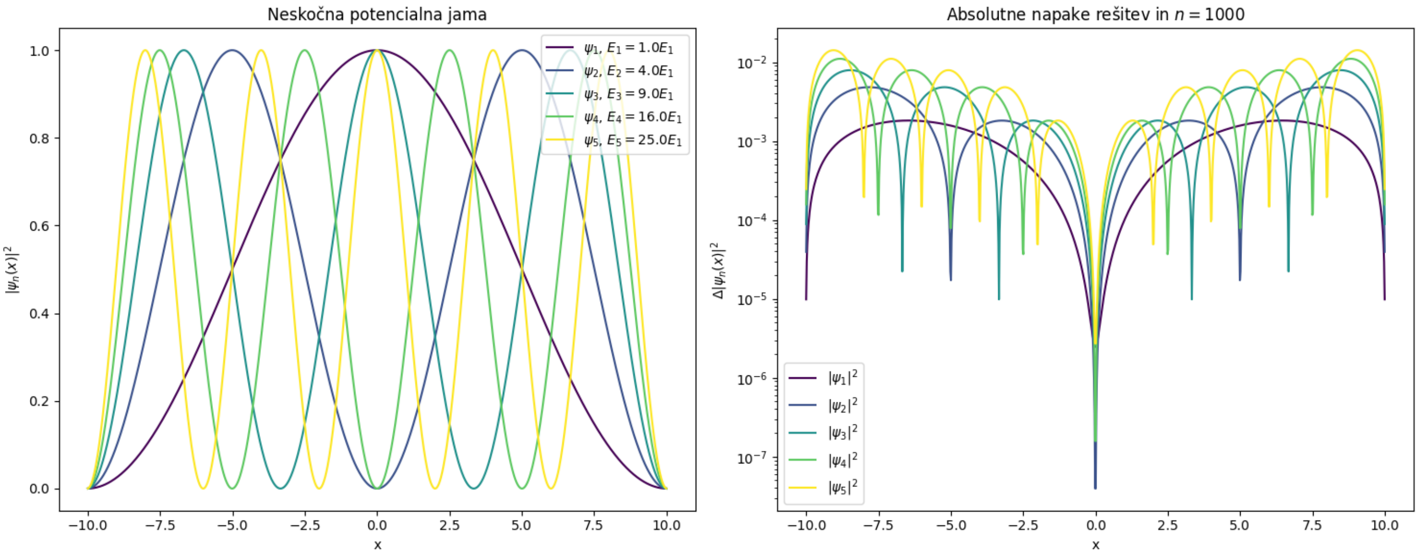
Slika 1: Valovne funkcije za neskončno potencialno jamo z diferenčno metodo.

Prikazal sem še verjetnostno gostoto na sliki 2.

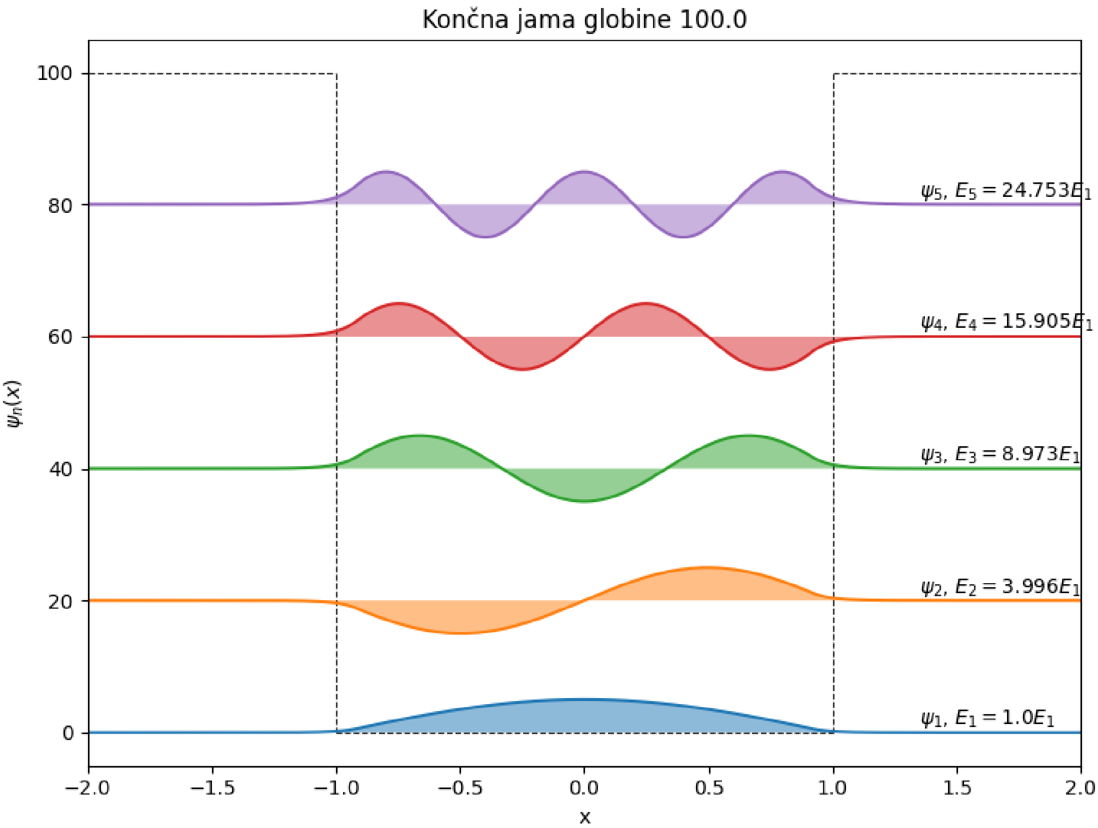
Nato smo še vpeljali končno višino potencialne jame. Na grafu 3 sem valovne funkcije premaknil za lepši prikaz. Izračunane lastne energije si je vredno zapomniti za primerjavo z strelsko metodo.

Če postavimo višino potencialne jame zelo nizko lahko opazimo kako izgledajo rešitve za nevezana stanja 4.

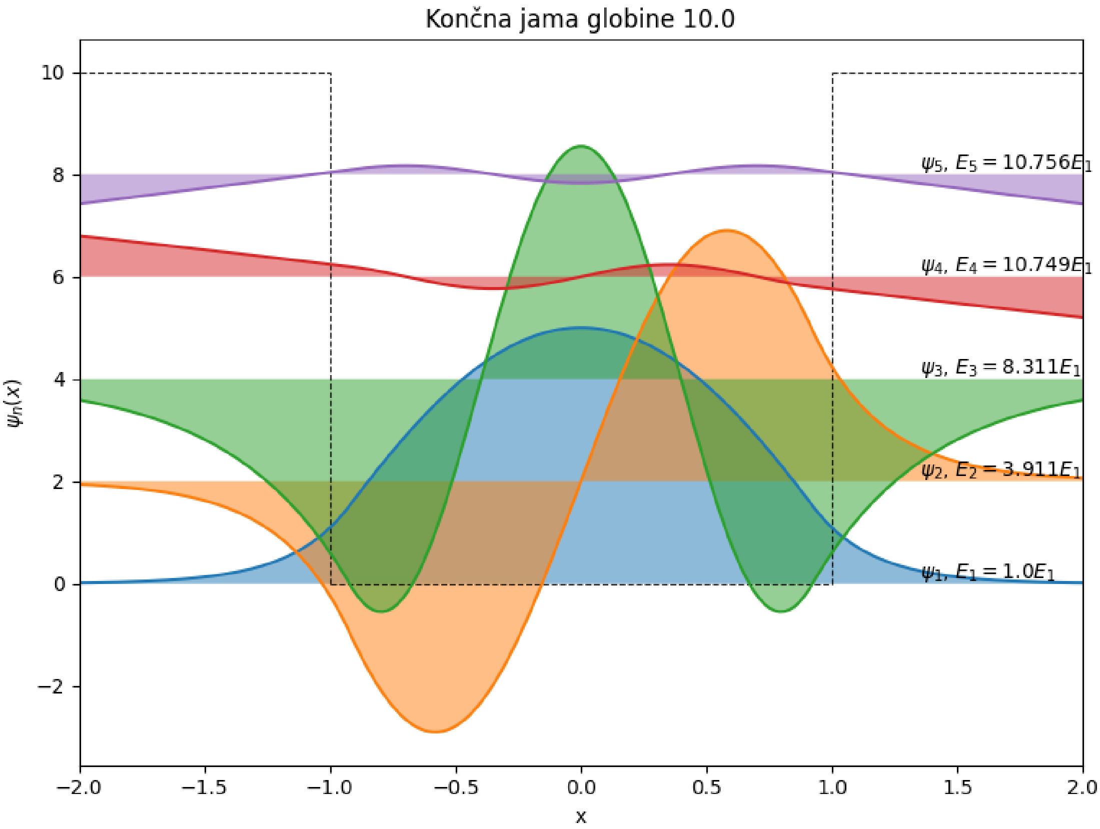
Dodatno je potrebno povdariti, da je pri diferenčni metodi zelo pomembna velikost same matrike pri diagonalizaciji, saj močno vpliva na končno natančnost (ja lahko bi prikazal na grafu). Ta vpliv je delno le razviden na uč iz preprostega grafa 5



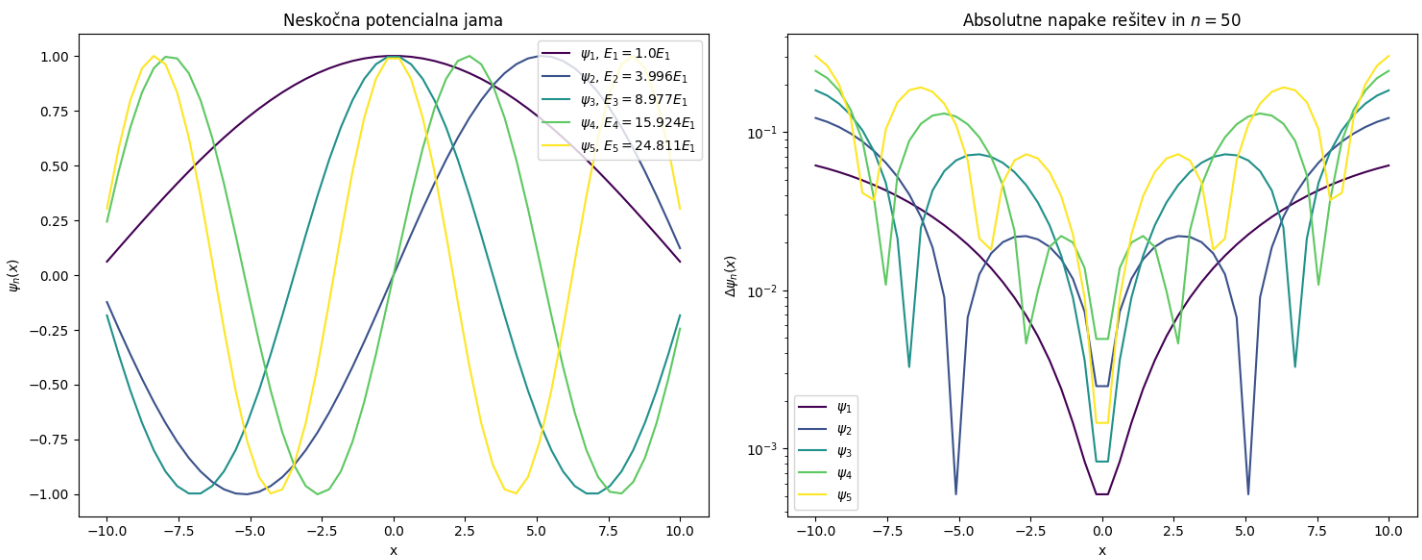
Slika 2: Verjetnostna gostota za neskončno potencialno jamo.



Slika 3: Valovne funkcije za končno potencialno jamo.



Slika 4: Nevezana stanja končne jame.

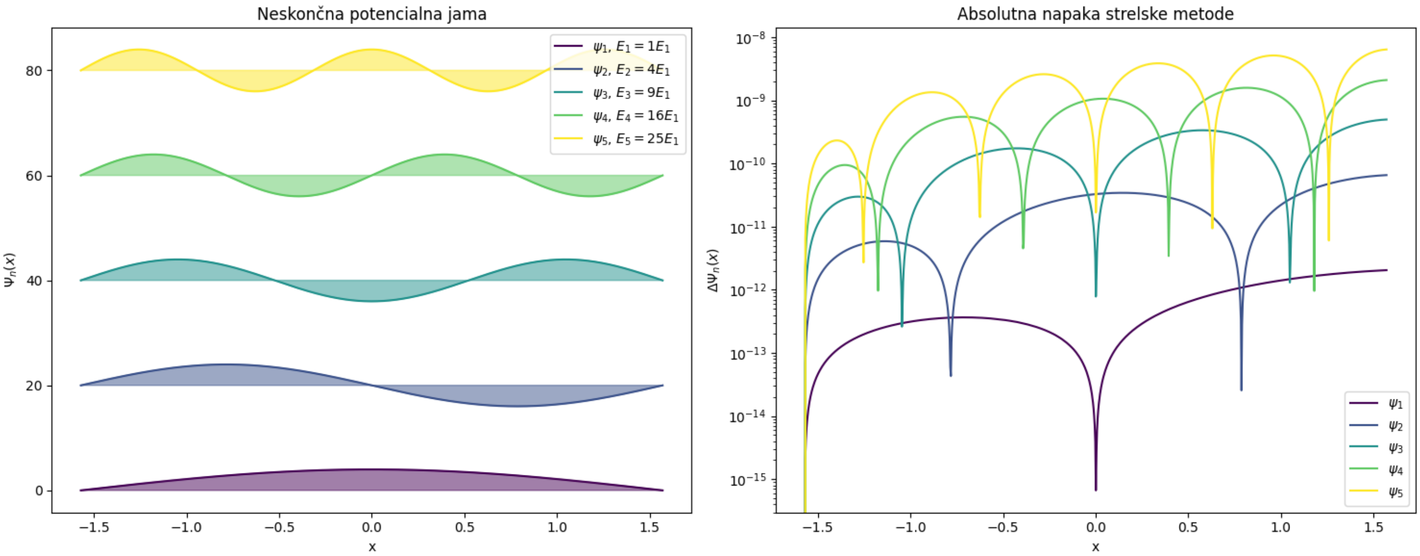


Slika 5: Kvarjenje natančnosti pri majhni dimenziji n.

4 Strelska metoda

4.1 Neskončna jama

Za strelsko metodo pri neskončni potencialni jami sem predpostavil, da bom zadel vrednosti energije pri n^2 (iz analitične rešitve), zato sem vzel le to kot prvi približek. S streljanjem zopet dobim lastne funkcije, prvih pet je prikazanih na sliki 6. Za razliko od diferenčne metode je pri napaki opazno večanje z razdaljo, kot povedano na predavanjih, za strelsko metodo velja seštevanje napake dlje kot streljamo.



Slika 6: Lastne funkcije neskončne potencialne jame z strelsko metodo.

4.2 Iskanje energij

Pri končni potencialni jami smo najprej morali poiskati pri katerih lastnih energijah ('kotih') zadanemo prave vrednosti. Tukaj sem se lotil s pomočjo posnetka priloženega v literaturi [1], kjer sem namesto slepega streljanja in bisekcije, reševal transcendentno enačbo.

Zanimajo nas le energije kjer imamo vezana stanja $-V_0 < E < 0$. vemo, da je, $\sqrt{-E}$ realno.

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2} - V_0\right)\psi = E\psi \qquad \Longrightarrow \qquad \boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} = -k^2\psi} \qquad \text{, kjer je} \quad k = \sqrt{E+V_0}$$

$$\left(-\frac{d^2}{dx^2}\right)\psi = E\psi \qquad \Longrightarrow \qquad \boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} = l^2\psi} \qquad \text{, kjer je} \quad l = \sqrt{-E}$$

Ker je Hamiltonian simetričen, so rešitve sode ali lihe funkcije. Tako dobimo rešitve:

$$\psi_{\text{even}}(x) = \begin{cases} Ae^{lx} & x < -1 \\ D\cos(kx) & -1 \le x \le 1 \\ Ae^{-lx} & x > 1 \end{cases}$$

$$\psi_{\text{odd}}(x) = \begin{cases} Ae^{lx} & x < -1 \\ C\sin(kx) & -1 \le x \le 1 \\ Ae^{-lx} & x > 1 \end{cases}$$

ψ in $d\psi/dx$ sta zvezna v -1 in 1.

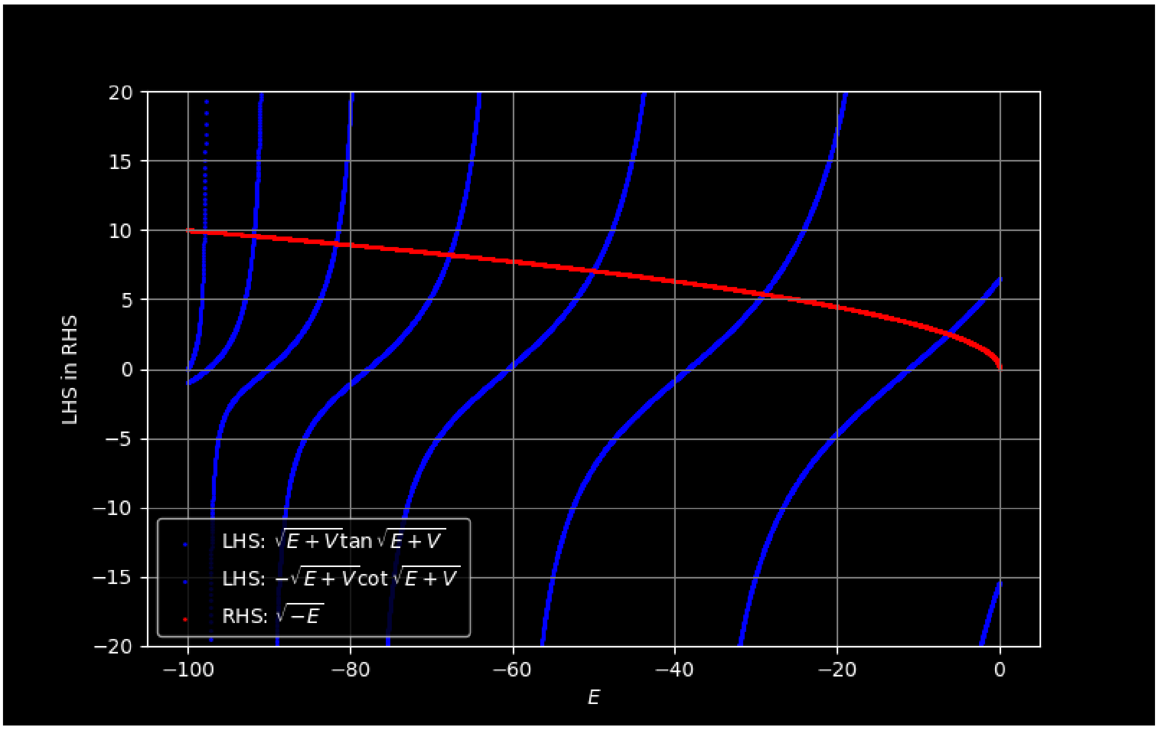
Soda: $D\cos(k) = Ae^{-l}$ in $-kD\sin(k) = -lAe^{-l}$. Delimo in dobimo $k\tan(k) = l$ iz česar sledi

$$\boxed{\sqrt{E+V_0}\tan\left(\sqrt{E+V_0}\right) = \sqrt{-E}} \tag{2}$$

Liha: $C\sin(k) = Ae^{-l}$ in $kC\cos(k) = -lAe^{-l}$. Podobno tudi tu $k\cot(k) = -l$

$$\boxed{-\sqrt{E+V_0}\cot\left(\sqrt{E+V_0}\right) = \sqrt{-E}} \tag{3}$$

Narišemo krivulje 7. Energije vezanih stanj so tiste kjer se desna stran in leva stran enačb 2 in 3 sekata.



Slika 7: Krivulji LHS in RHS.

Da dobimo željene vrednosti poiščemo kje se sekajo krivulje, to najlažje storimo tako, da krivulji odštejemo in poiščemo ničle 8.

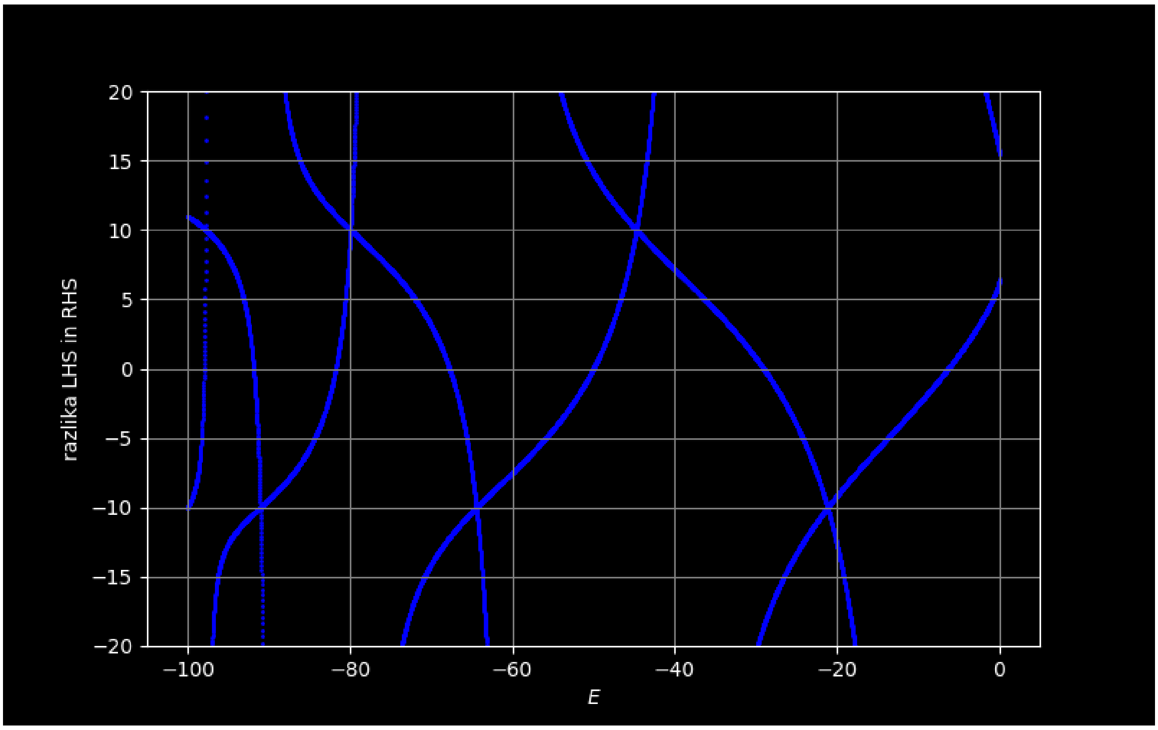
Za rezultate sem dobil vrednosti energije navedene v spodnji tabeli 1. Razvidno je, da se izračunane energije pri majhnem n ujemajo z natančnostjo 10^{-2}, vendar napaka hitro narasstane ko gremo k višjim energijam.

E_n $[E_1]$	E_1	E_2	E_3	E_4	E_5
FD	1.0	3.996	8.973	15.905	24.753
Shoot	1.0	3.992	8.951	15.826	24.519

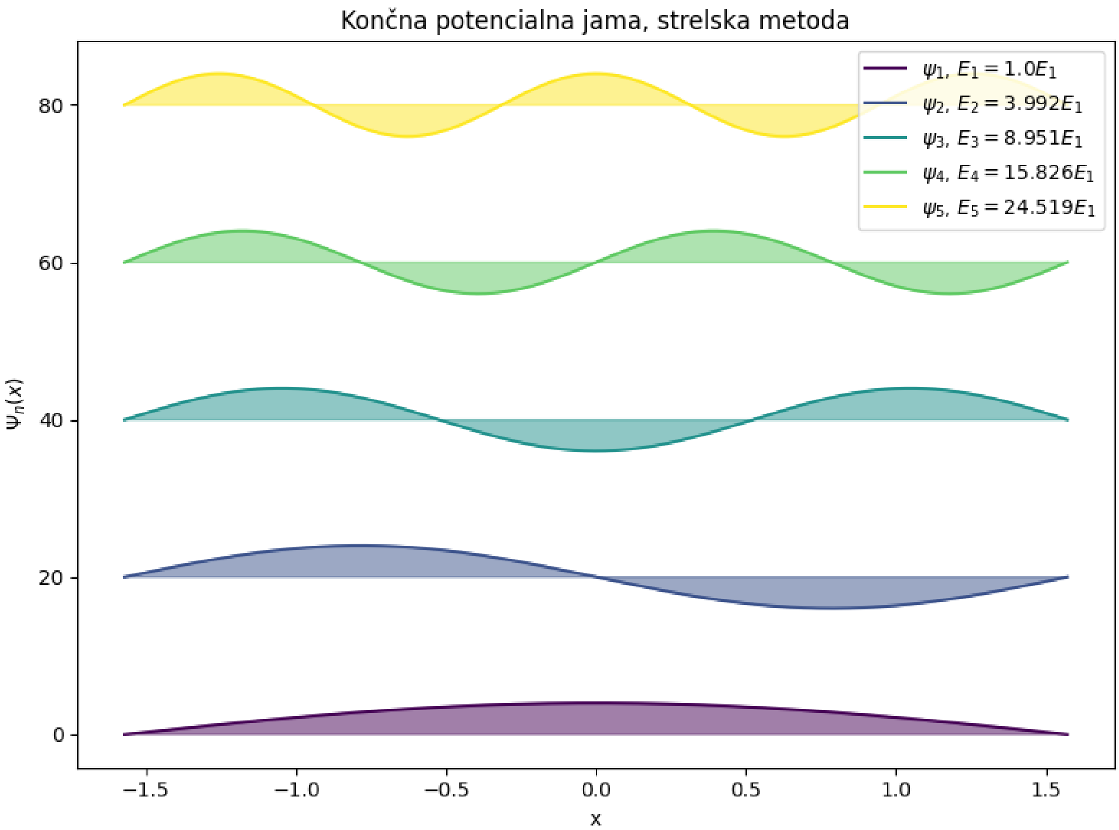
Tabela 1: Tabela vrednosti energij.

4.3 Končna potencialna jama

Za konec še končna potencialna jama z strelsko metodo. Vzamem energije izračunane s transcendenčnimi enačbami in uporabim strelsko metodo, da dobim lastne funkcije prikazane na grafu 9



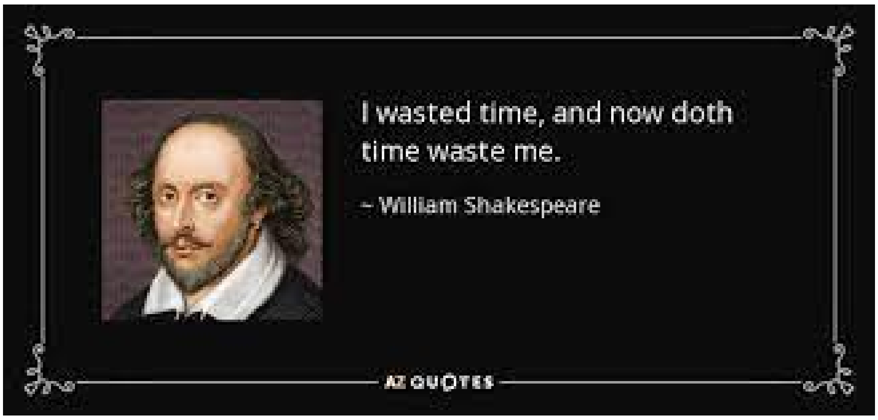
Slika 8: Razlika LHS in RHS.



Slika 9: Valovne funkcije končne potencialne jame s strelsko metodo.

5 Zaključek

Cilj naloge je bil, da se spoznamo s strelsko metodo in metodo končnih diferenc za reševanje diferencialnih enačb z robnimi pogoji. Osebni cilj mi je bil nalogo narediti v 1 dnevu...
Glede na uro poslanega poročila, mislim da mi ni potrebno komentirati posledice le tega, zato Vas zapuščam s Shakespearovim citatom:



Literatura

[1] Luke Polson, *The Finite Square Well: *Two* Methods Every Physicist Should Know.*