# Određivanje talasne funkcije metodom propagacije imaginarnog vremena

Jovan Marković, Marko Tošić

Novembar 2020.

## 1 Apstrakt

U ovom radu osmišljen i napravljen je program pomoću kog se rešava 1D Šredingerova jednačina za razne potencijale. Kao jako bitan metod korišćena je propagacija imaginarnog vremena. Dobijeni rezultati u skladu su sa očekivanim vrednostima za početne potencijale, program se pokazao kao koristan i ispravan.

## 2 Uvod

Talasna funkcija predstavlja matematički opis kvantnog stanja nekog kvantnog sistema. Kvadrat modula talasne funkcije u nekoj tački prostora odgovara gustini verovatnoće pronalaska čestice u toj tački. Zbog ovoga važi $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1$ jer pri merenju čestica mora zauzeti određeni položaj u prostoru. Talasna funkcija opisana je diferencijalnom jednačinom - Šredingerovom jednačinom. Matematički oblik Šredingerove jednačine zavisi od fizičkog sistema koji ona opisuje, a u ovom radu razmatrana je vremenski-zavisna Šredingerova jednačina koja u jednoj dimenziji glasi:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = (-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x,t))\Psi(x,t)$$

Kako Šredingerova jednačina nema analitičko rešenje u opštem slučaju, ona je numerički rešavana metodom propagacije imaginarnog vremena. Da bi se iz date jednačine uklonili kompleksni brojevi (da bi se jednačina mogla kompjuterski obraditi), koristi se metoda propagacije imaginarne vremena. Ona podrazumeva smenu $\Delta t = -i\Delta t$ gde $\Delta t$ predstavlja korak vremena u našem radu nakon što se Šredingerova vremenski-zavisna jednačina numerički reši Ojlerovom metodom.

## 3 Metod

Pomoću programskog jezika Python ispisan je program koji rekurzivnom metodom i uz pomoć smene imaginarnog vremena rešava 1D Šredingerovu jednačinu za razne potencijale. Drugi i prvi izvod koji se pojavljuju u jednačini aproksimirani su sledećom formulom (za drugi izvod je upotrebljena dvaput).

$$f'(x) = \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

Ova formula važi za bilo koju funkciju i proizvoljno ali dovoljno mali korak $\Delta x$. Primenom ove aproksimacije i imaginarnog vremena dobijamo sledeće rekurzivno rešenje Šredingerove jednačine.

$$\Psi[i,j] = \Psi[i,j-1] + \frac{\Delta t}{\Delta h^2}(\Psi[i+1,j-1] - 2\Psi[i,j-1] + \Psi[i-1,j-1]) - V[i]\Psi[i,j-1]\Delta t \quad (1)$$

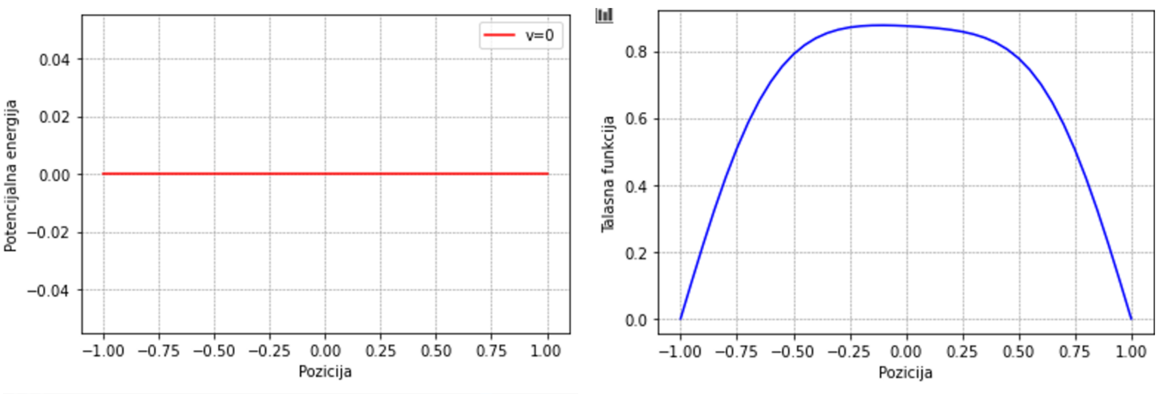
U ovoj jednačini je talasna funkcija Psi predstavljena kao matrica, gde je $i$ indeks dimenzije prostora i $j$ indeks dimenzije vremena ($x = i\Delta x$ i $t = j\Delta t$), a $V[i]$ je potencijal na mestu sa indeksom $i$. Granični uslovi matrije talasne funkcije glase da za svako $j$ važi $\Psi[0,j] = 0$ i $\Psi[L,j] = 0$, kako se za postavku rada razmatra čestica u potencijalnoj jami gde su potencijali unutar jame promenljivi, ali i za svako $i$ važi $\Psi[i,0] = 5 + rand(0,1)$, odnosno da je talasna funkcija u početnom trenutku nasumičan niz brojeva od 5 do 6, gde daljom primenom petlje ona konvergira u tačnu formu i dospeva u stacionarno stanje. U svakoj iteraciji petlje vremena, novodobijene vrednosti $\Psi[i,j]$ se takođe normiraju, odnosno vrši se korekcija njihove vrednosti tako da važi sledeće.

$$1 = \int_0^L \Psi[i,j]^2 \, dx$$

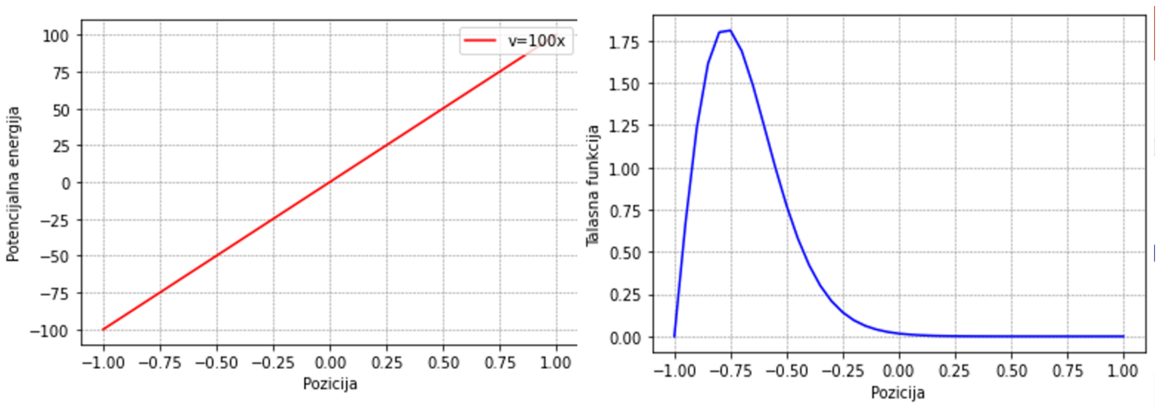
Ovde je $L$ dužina jame u kojoj se javlja potencijal, a integral važi od 0 do $L$ upravo jer je oblast van toga opisana beskonačnim potencijalom. Ubacivanjem jednačine (1) u petlje unutar programa dobija se čitava matrica $\Psi[i,j]$ za zadato $V[i]$. Crtanjem grafika zavisnosti prostorne komponente u jednom od krajnjih vremenskih komponenti matrice $\Psi[i,j]$ od vrednosti prostora ($x = i\Delta x$) dobijamo željenu zavisnost u stacionarnom stanju.

# 4 Rezultati

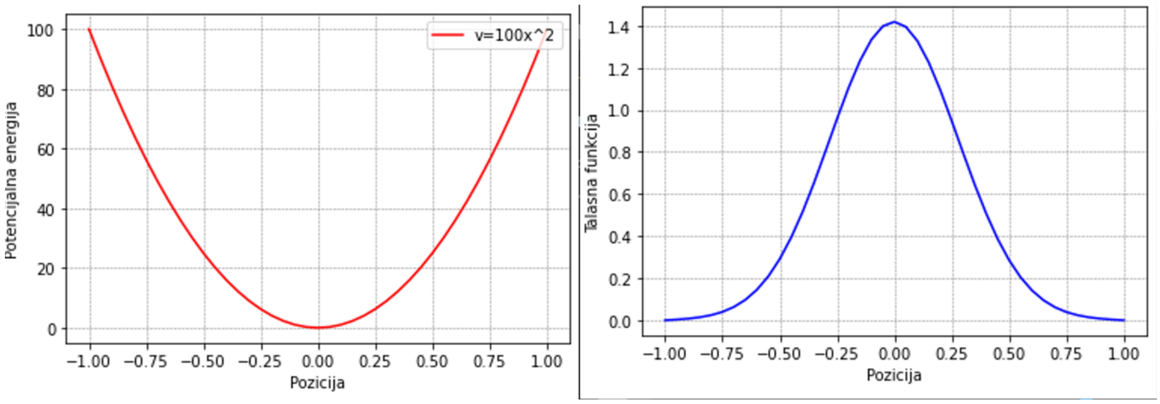
Metod je uspešno primenjen za razne potencijale. Ipak, u svetlu korišćene formule (1), dobijena je talasna funkcija samo za osnovno stanje.



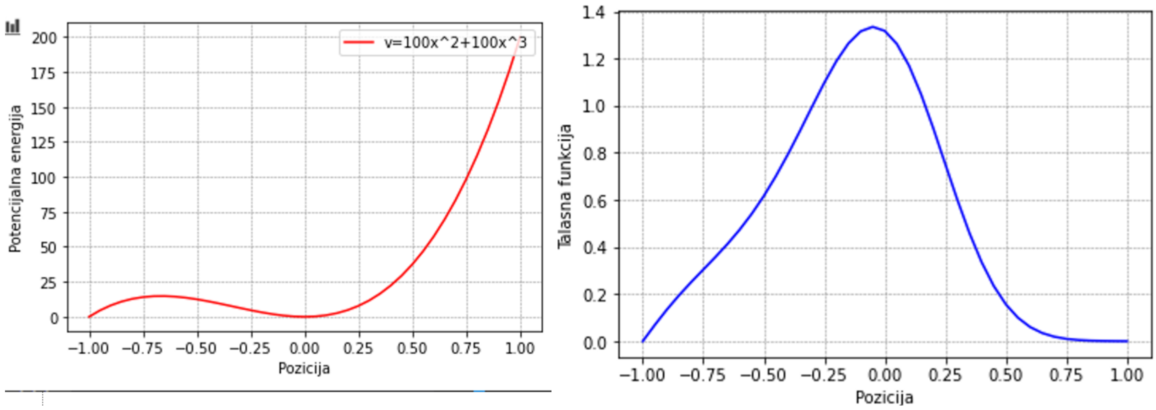

Slika 1: Potencijal unutar jame 0




Slika 2: Potencijal unutar jame linearan




Slika 3: Potencijal unutar jame paraboličab




Slika 4: Potencijal unutar jame anharmonijski

# 5 Diskusija i nedostaci metode

Svi oblici talasne funkcije očekivani su za date potencijale. Velika prednost metode je u tome što za veliki broj potencijala može dati odgovarajuča rešenja, a može se modifikovati da daje rešenja i za više dimenzije prostora, i da bude primenljiva za viša stacionarna stanja. Nedostatak metode je da kvadrat koraka prostora i korak vremena moraju biti istog reda veličine kako formula ne bi dobila pretarano velike ili male vrednosti. Ovo ograničava mogućnost programa da uspešno reši neke potencijale zbog velike memorije koju bi zauzimao.

# 6 Reference

[1] ”Analytical Imaginary Time Propagation at a Single Point” (2008) - P. Behroozi, http://large.stanford.edu/courses/2008/ph372/behroozi2/
[2] ”Numerical Differentiation- https://www.scss.tcd.ie/Rozenn.Dahyot/CS7ET01/01112007.pdf
[3] ”Normalization of the Wavefunction- http://farside.ph.utexas.edu/teaching/qmech/Quantum/node34.html
[4] ”Python For Loops- textbfhttps://www.w3schools.com/python/python$_{f}or_{l}oops.asp$