

# Schrodingerjeva enačba za en delec, Časovni razvoj

1. domača naloga v sklopu predmeta  
Višje računske metode

Avtor:

Matic Tonin

Vpisna številka: 28222066

Profesor: prof. dr. Tomaž Prosen

Asistent: asist. Jaš Bensa

---

Pod okvirom:

FAKULTETE ZA FIZIKO IN MATEMATIKO, LJUBLJANA

Akademsko leto 2022/2023

# 1 Aharmonski oscilator

Pri tej nalogi se bomo soočali z reševanjem Schrodingerjeve enačbe s pomočjo diskretnih metod in danih namigov, kako je smiselno problem predstaviti na mreži, kjer vsaka koordinata  $m, n$  predstavlja del časovnega in krajevnega razvoja valovne funkcije. Ker pa so koraki omejenih velikosti ter je tudi sama matrika končna, bo naša aproksimacija nestabilna, kar bomo poskusili popraviti na več različnih načinov.

## 1.1 Teoretični del

Predstavimo naš začetni problem. Imamo anharmonski oscilator s potencialom oblike

$$V(x) = \frac{1}{2}x^2 + \lambda x^4.$$

Za začetno valovno funkcijo bomo vzeli eno izmed lastnih funkcij harmonskega oscilatorja  $\psi(x, t) = \psi(hm, \tau n)$  ter nato poskusili problem razviti okoli njih.

Iz predavanj vemo, da lahko problem obravnavamo na več različnih načinov:

### 1.1.1 Končni propagator

V Schrodingerjevi enačbi lahko naš propagator za končni korak razvijemo v vrsto:

$$\psi_{m,n+1} = \{\exp(-i\tau\hat{H})\psi\}_{m,n} = \sum_{k=0}^K \frac{(-i\tau)^k}{k!} (\hat{\mathbf{H}}^k \psi)_{m,n} + \mathcal{O}(\tau^{K+1}) \quad (1)$$

in tako ob vsakem koraku  $n$  potrebujemo napraviti vsoto po  $k$  razvoju propagatorja. Matriko  $\mathbf{H}$  pa tako potrebujemo  $k$ -krat množiti samo s seboj.

Poglejmo si, kakšne slike dobimo v tem primeru.

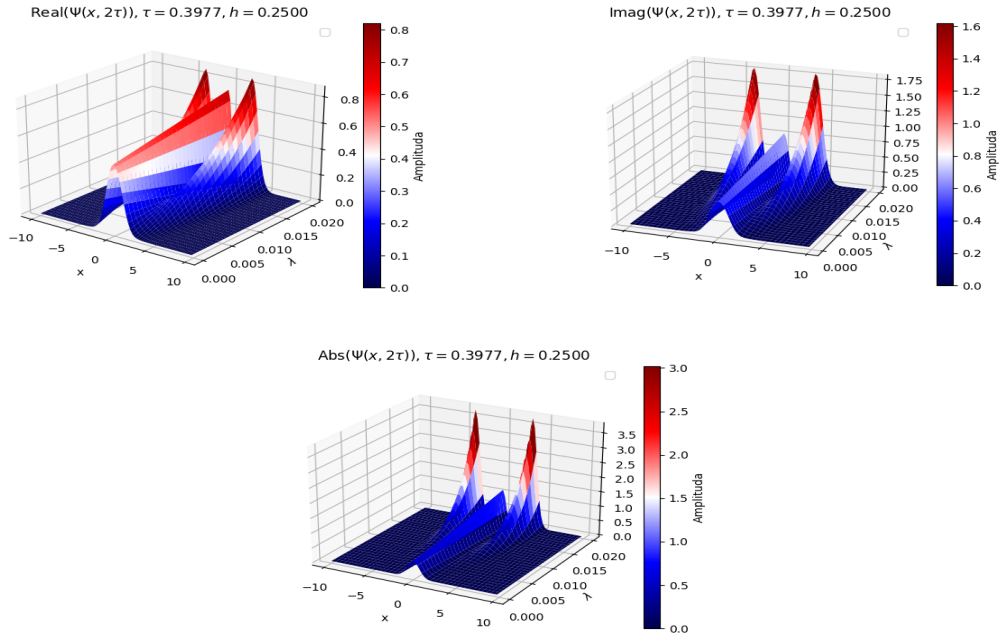


Figure 1: Prikaz valovne funkcije  $\Psi(x, t)$ , kjer je  $t = 2\tau$  za različne  $\lambda$

Opazimo lahko, da grafi že pri  $2\tau$  za malo večje vrednosti  $\lambda$  začnejo divjati. Tako lahko sklepamo, da je korak premajhen, kar tudi testiramo na sliki 2.

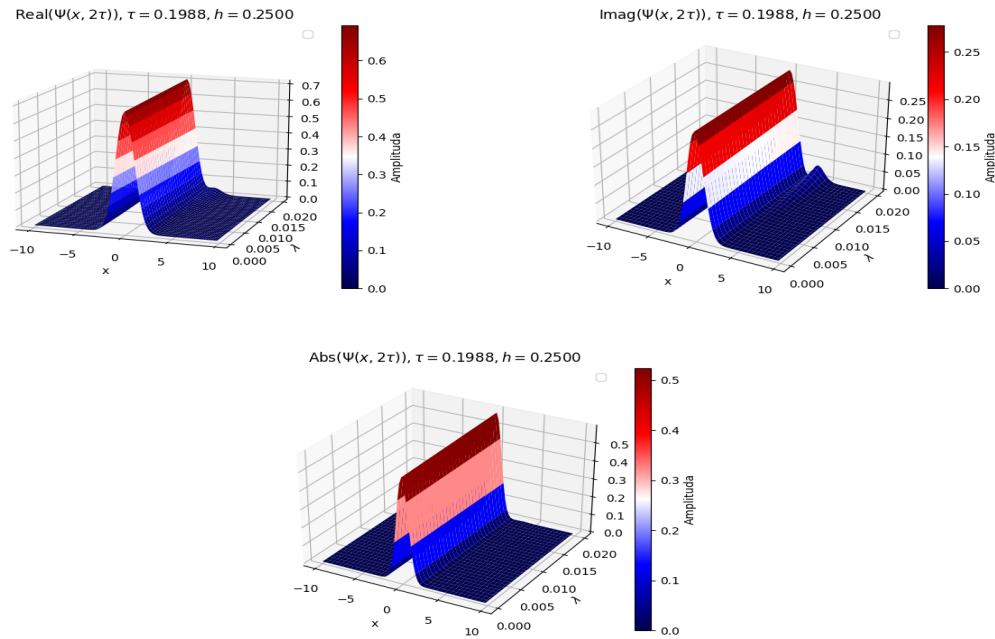


Figure 2: Prikaz valovne funkcije  $\Psi(x, t)$ , kjer je  $t = 2\tau$  za različne  $\lambda$  z manjšim  $\tau$

Takoj je razvidno, da je metoda z zmanjšanjem  $\tau$  bolj stabilna, a se vseeno pri  $\lambda = 0.02$  že začnejo pojavljati repi, ki ne ohranjajo verjetnosti. Sam graf časovnega razvoja v odvisnosti od  $\lambda$  pa si lahko pogledamo spodaj.

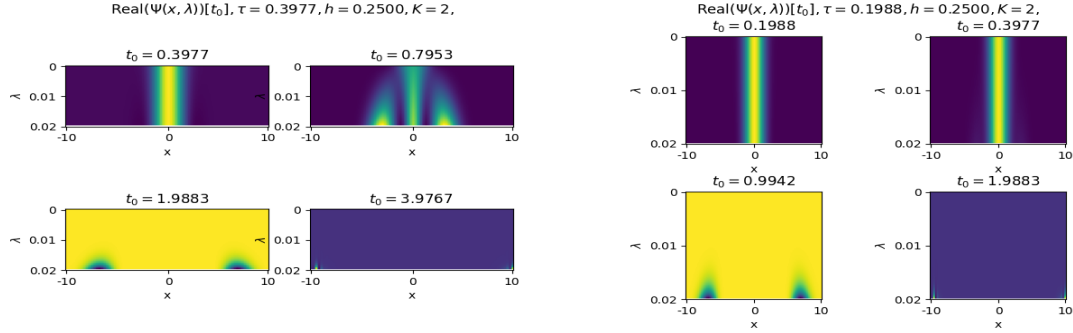


Figure 3: Prikaz časovnega razvoja valovne funkcije. Vsak kvadrateg predstavlja valovno funkcijo za različne vrednosti  $\lambda$  v določenem času.

Kot je razvidno iz grafov, se nam z manjšanjem koraka sama aproksimacija močno izboljšuje, še vedno pa ne uspemo dobiti dobrega razvoja, zato lahko poskusimo časovni razvoj izvesti z implicitno metodo.

### 1.1.2 Implicitna metoda

Ena izmed možnosti je tudi implicitna metoda

$$e^{-i\tau\hat{\mathbf{H}}} = \left(1 + i\frac{\tau}{2}\hat{\mathbf{H}}\right)^{-1} \left(1 - i\frac{\tau}{2}\hat{\mathbf{H}}\right) + \dots$$

Če sedaj z njim napišemo našo Sh. enačbo v diskretni obliki, dobimo

$$\left\{ \left(1 + i\frac{\tau}{2}\hat{\mathbf{H}}\right) \psi \right\}_{m,n+1} = \left\{ \left(1 - i\frac{\tau}{2}\hat{\mathbf{H}}\right) \psi \right\}_{m,n}. \quad (2)$$

Ker pa sta si člena pred vektorji podobna med seboj, lahko dani izraz prepišemo v sistem

$$\mathbf{A}^+ \psi_{n+1} = \mathbf{A}^- \psi_n$$

kjer je  $\mathbf{A}^\pm = \left(1 \pm i\frac{\tau}{2}\hat{\mathbf{H}}\right)$ ,  $\psi_n$  pa je v resnici predstavlja vektor z  $m$  komponentami  $n$ -tega časovnega razvoja valovne funkcije. Sedaj pa potrebujemo razpisati naši dve matriki  $\mathbf{A}$  s pomočjo končnih diferenc. Za Hamitoljan vemo, da je enak

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\partial_x^2 + V(x)$$

in takoj lahko opazimo, da bomo potrebovali diskretno obliko odvoda, ki smo jo zapisali že na predavanjih. Tako je  $m$ -ta komponenta odvoda enaka

$$(\partial_x^2 \psi)_m = -\frac{1}{12h^2} (\psi_{m+2} + \psi_{m-2}) + \frac{4}{3h^2} (\psi_{m+1} + \psi_{m-1}) - \frac{5}{2h^2} \psi_m + \mathcal{O}(h^4) \quad (3)$$

Tako vidimo, da ima naša matrika  $\mathbf{A}$  pet diagonalami sicer na mestih  $m+2, m+1, m, m-1, m-2$ .

$$\mathbf{A}^\pm = 1 \mp \frac{i\tau}{4h^2} \begin{bmatrix} a_0 & 4/3 & -1/12 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 4/3 & a_1 & 4/3 & -1/12 & 0 & \dots & 0 \\ -1/12 & 4/3 & a_2 & 4/3 & -1/12 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \ddots & & \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -1/12 & 4/3 & a_{m-1} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

kjer je  $a_k = -\frac{5}{2} - 2h^2 \left[ \frac{1}{2}(hm)^2 + \lambda(hm)^4 \right]^1$ . S tem pa smo si samo reševanje sistema precej olajšali, saj vidimo, da tako rešujemo problem oblike

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b},$$

ki pa ga znamo rešiti preko različnih numeričnih metod. Tako bomo morali za vsak časovni korak  $\Delta t = \tau$  rešiti sistem (4) in dobiti vektor  $\psi_{n+1}$  ter nato metodo razvijati do danega časa  $t$ .

Če ponovno pogledamo, kako se stanje  $\Psi(x, 2\tau)$  spreminja s časom, dobimo

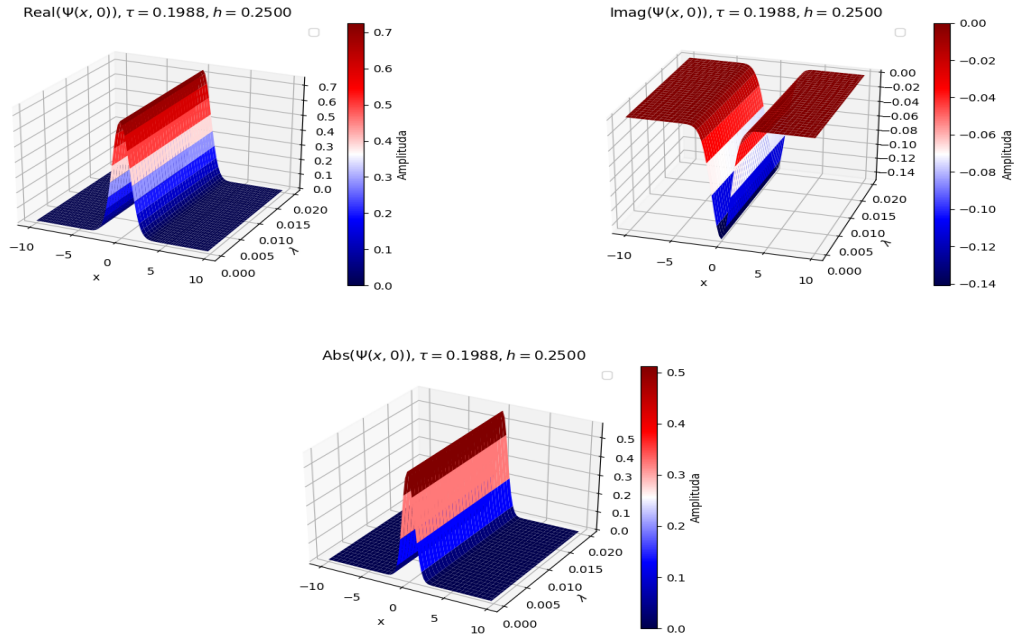


Figure 4: Prikaz valovne funkcije  $\Psi(x, t)$ , kjer je  $t = 2\tau$  za različne  $\lambda$  z manjšim  $\tau$

Takoj lahko opazimo, da lahko z isto velikostjo koraka kot pri propagatorju, dosežemo lepe rezultate za veliko večje vrednosti  $\lambda$ . Še vseeno pa se pojavi vprašanje, ali je dana metoda dobra tudi za večje vrednosti, kot pa je  $2\tau$ . Zato si pogledjmo naslednje časovne razvoje.

<sup>1</sup>V tem koraku smo  $x$  nadomestili z  $hm$

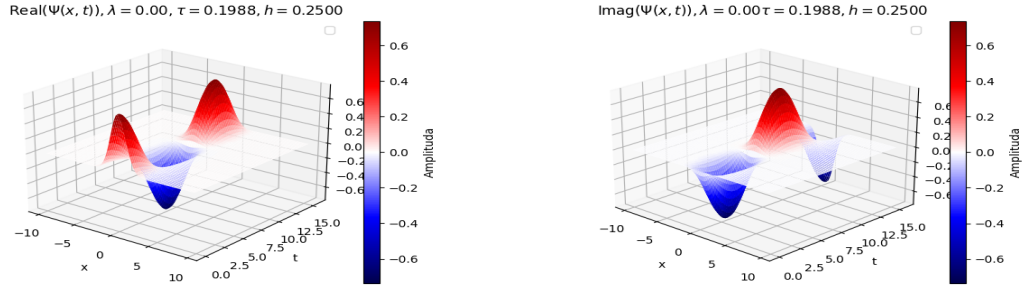


Figure 5: Prikaz časovnega razvoja valovne funkcije  $\Psi(x, t)$ , za  $\lambda = 0$

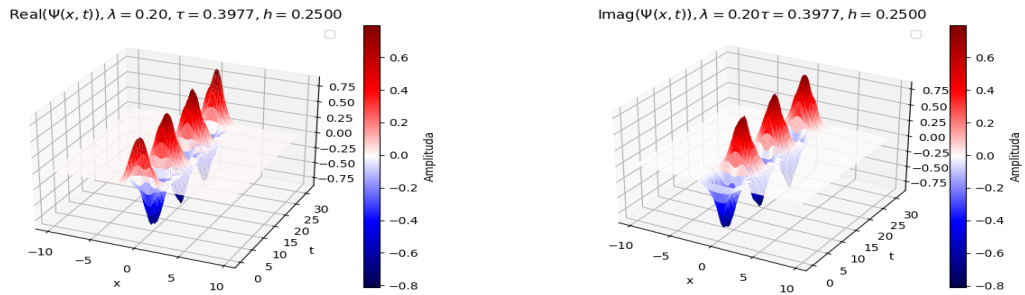


Figure 6: Prikaz časovnega razvoja valovne funkcije  $\Psi(x, t)$ , za  $\lambda = 0.2$

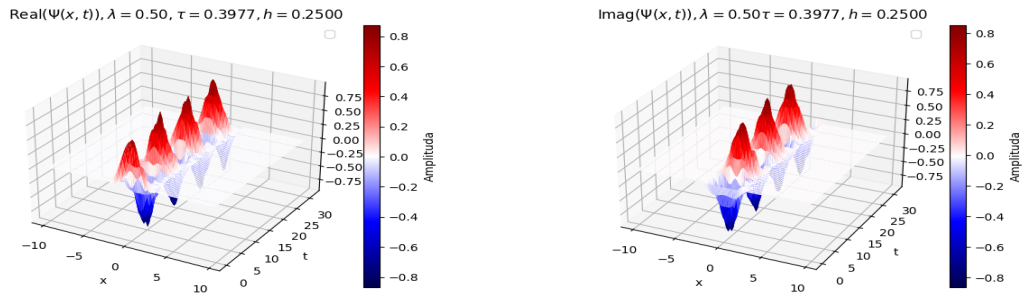


Figure 7: Prikaz časovnega razvoja valovne funkcije  $\Psi(x, t)$ , za  $\lambda = 0.5$

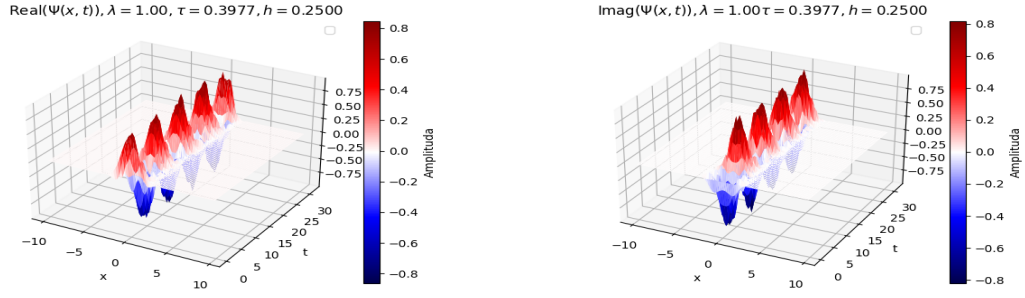


Figure 8: Prikaz časovnega razvoja valovne funkcije  $\Psi(x, t)$ , za  $\lambda = 1$

Vidimo lahko, da samo spreminjanje  $\lambda$  ne vpliva preveč na periodo časovnega razvoja valovne funkcije, močno pa vpliva na ostrino njenih vrhov. To si bomo lahko bolje pogledali v animacijah, ki so podane v priponki (vse animacije Prikaz razvoja.gif). Iz njih pa je razvidno tudi, da nam začne sama verjetnost precej nihati z večanjem vrednosti  $\lambda$ . Možna razlaga je, da smo vzeli premajhen korak v časovnem razvoju. Ampak kljub temu pa lahko vidimo, da je metoda veliko bolj uspešna kot propagator, ki že takoj podivja. To podivjanje metode pa si lahko pogledamo tudi na spodnjem grafu prikazov maksimumov valovne funkcije.

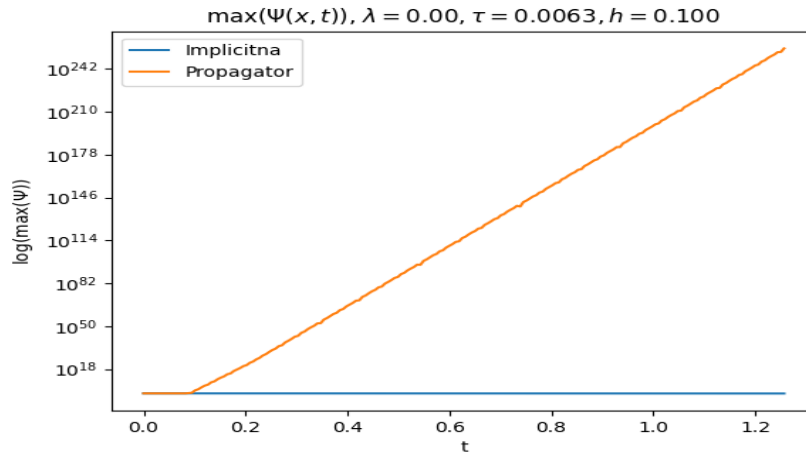


Figure 9: Prikaz maksimuma valovne funkcije v odvisnosti od časa za obe metodi

Opazno je, da vrednost maksimuma pri propagatorski metodi eksponentno narašča z vsakim korakom. Iz zgornjih 3D grafov pa bi sklepali, da gre v resnici za to, da bi morali dobit nihanje okoli ničelne vrednosti. To nam dobro pokaže spodnji graf.

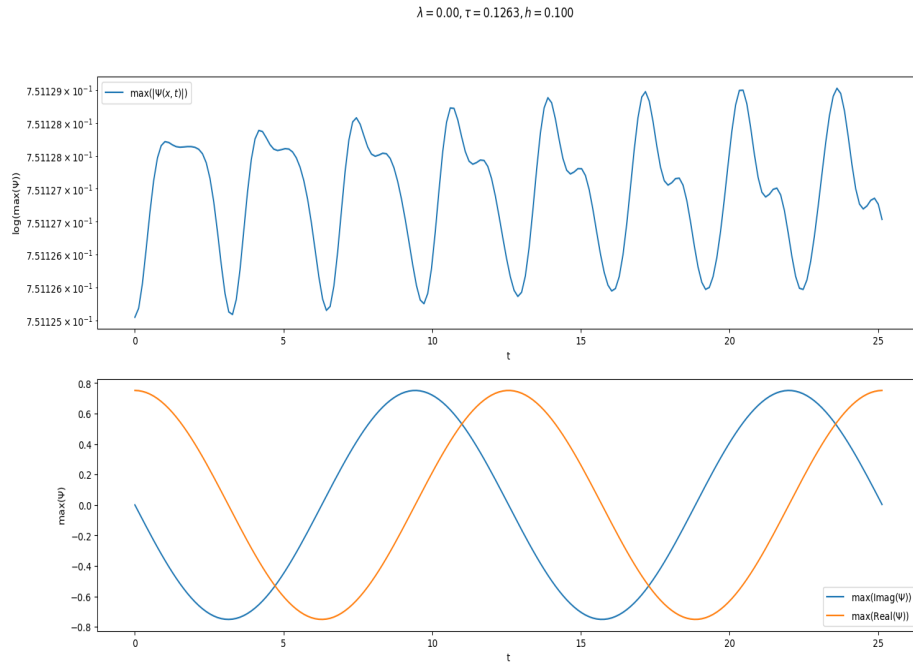


Figure 10: Prikaz maksimuma valovne funkcije v odvisnosti od časa za  $\lambda = 0$

Pogledamo pa si lahko tudi, kako se pozicije samih maksimumov spreminjajo z  $\lambda$ .

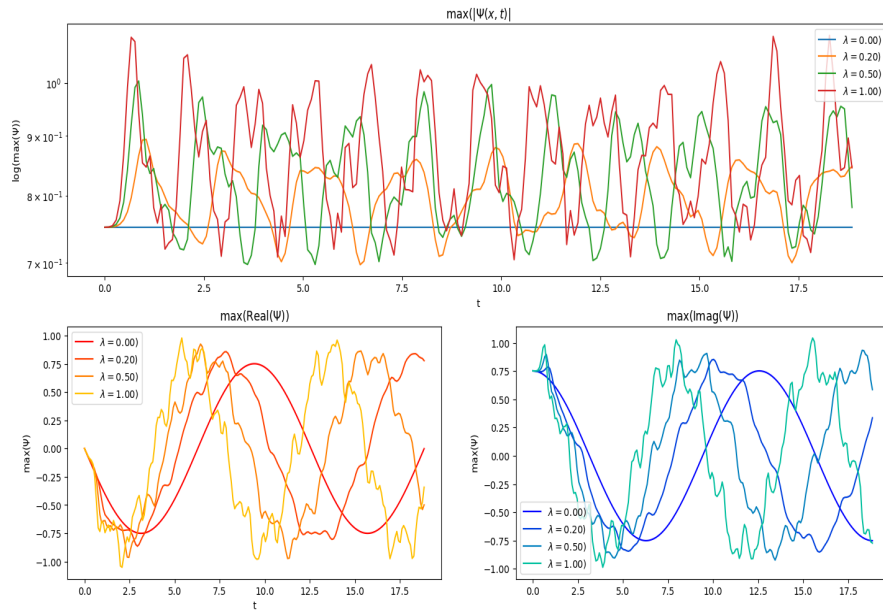


Figure 11: Prikaz maksimuma valovne funkcije v odvisnosti od časa in



Razvidno je, da se kljub naši napovedi sam nihajni čas maksimumov z večanjem  $\lambda$  zmanjšuje, medtem ko se oscilacije v absolutni vrednosti podaljšujejo. Kaj pa se zgodi v primeru višjih stanj in ne zgolj stanja  $\Psi_0$ ?

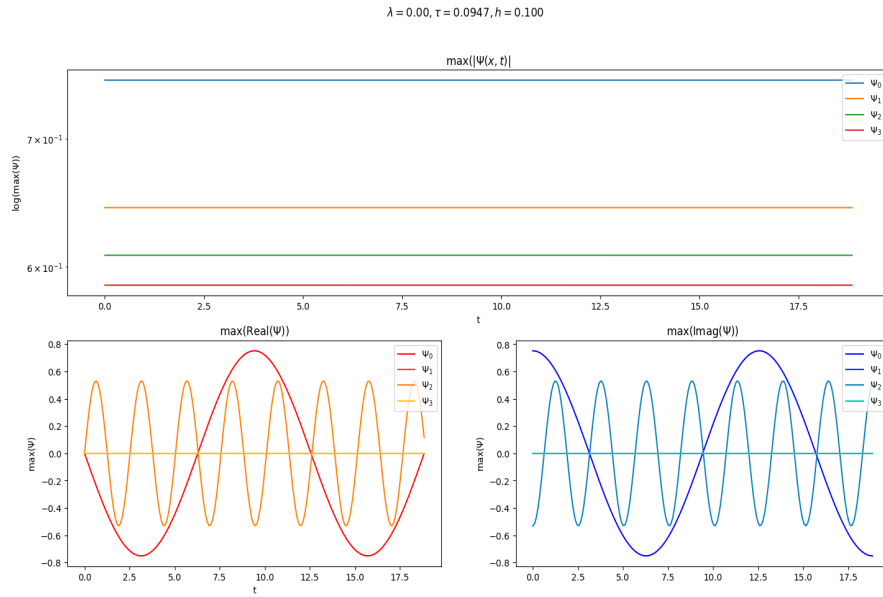


Figure 12: Prikaz maksimuma valovnih funkcij v odvisnosti od časa za različna stanja,  $\lambda = 0$

Razvidno je, da so verjetnosti za določene nivoje za  $\lambda = 0$  popolnoma ločene in tako nimamo nobene degeneracije med stanji. V primeru višjih  $\lambda$  pa pride do degeneracije, kar lahko opazimo na naslednjih slikah.

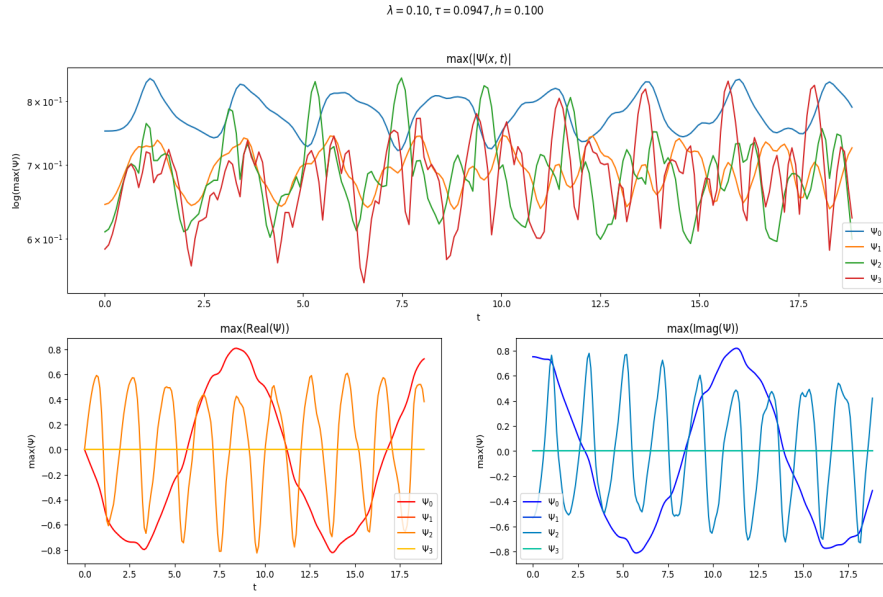


Figure 13: Prikaz maksimuma valovnih funkcij v odvisnosti od časa za različna stanja,  $\lambda = 0.1$

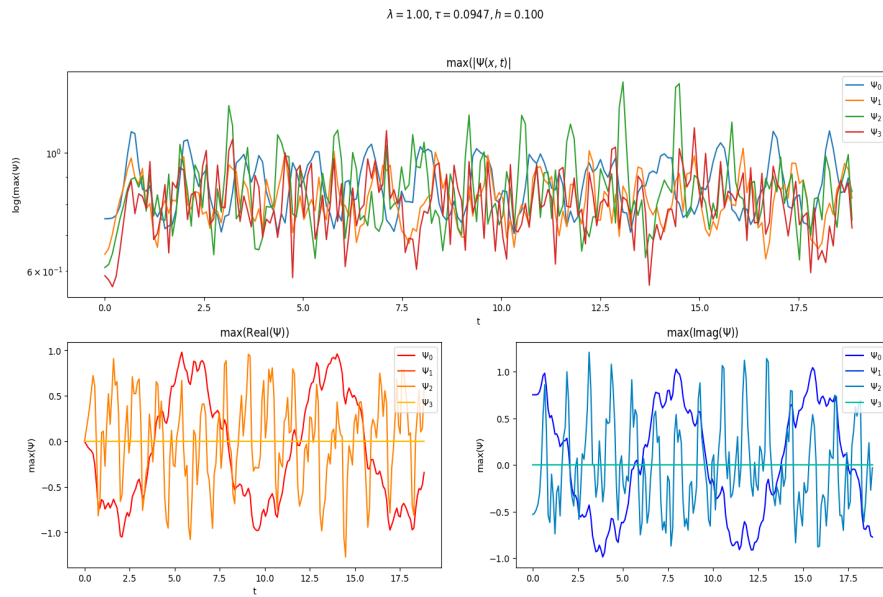


Figure 14: Prikaz maksimuma valovnih funkcij v odvisnosti od časa za različna stanja,  $\lambda = 1$

Prav zaradi tega pa bi lahko sklepali, da se naša verjetnost ne ohranja več, vendar začne eksponentno naraščati, saj nismo upoštevali stanj višjega reda.

## 2 Premaknjen oscilator

Za premaknjen oscilator bomo še vedno jemali stanja iz prve naloge, le da bomo s premikom tako zamenjali  $x \rightarrow x - a$ .

$$\psi(x, t = 0) = \varphi_0(x - a) \quad (5)$$

Ponovno bomo vzeli 5-členski razvoj matrike ter implicitno metodo, saj deluje bolje kot pa propagator. Njihovo gibanje pa si lahko pogledamo na naslednjih grafih.

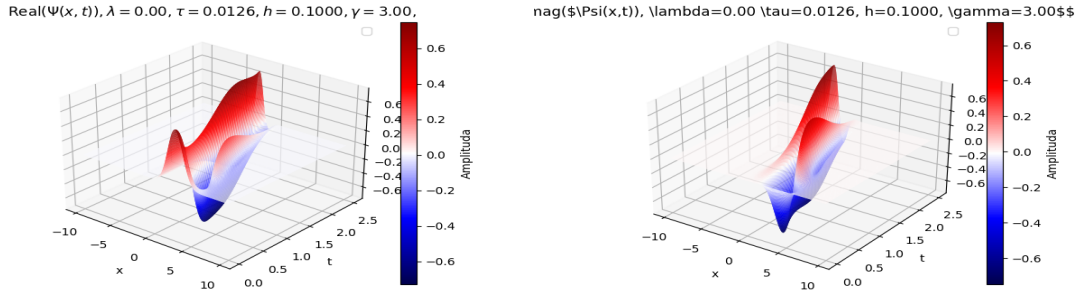


Figure 15: Prikaz časovnega razvoja valovne funkcije  $\Psi(x, t)$ , za  $\lambda = 0$   $\gamma = 3$

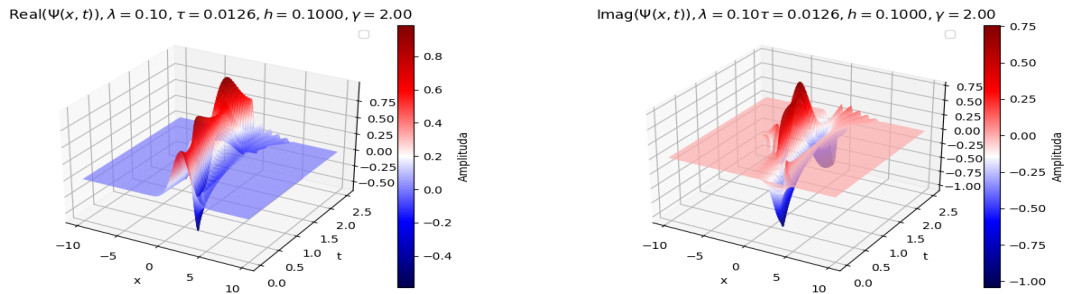


Figure 16: Prikaz časovnega razvoja valovne funkcije  $\Psi(x, t)$ , za  $\lambda = 0.1$   $\gamma = 2$

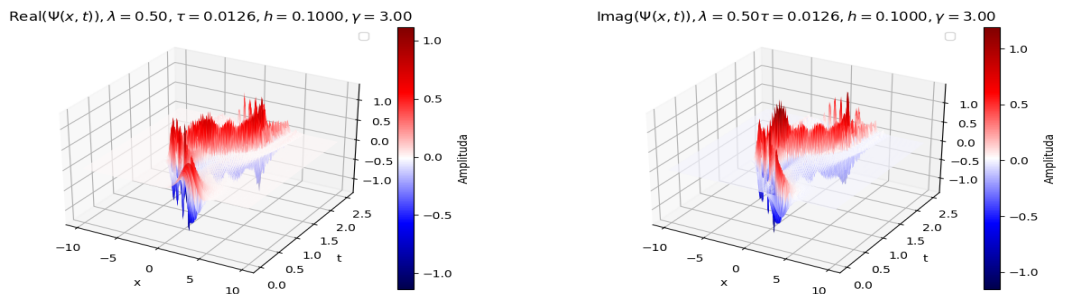


Figure 17: Prikaz časovnega razvoja valovne funkcije  $\Psi(x, t)$ , za  $\lambda = 0.5$ ,  $\gamma = 3$

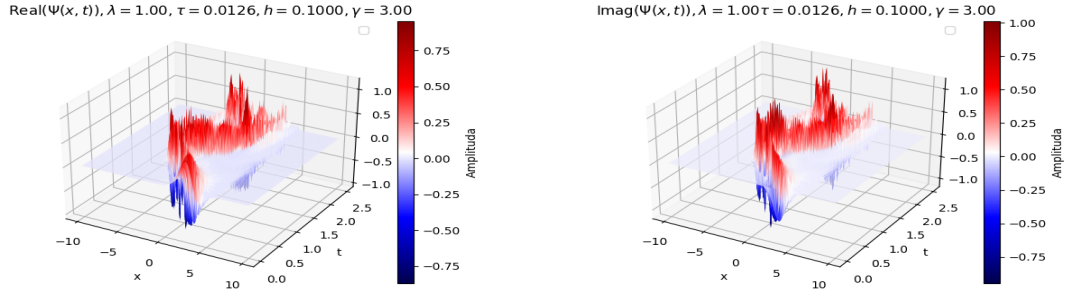


Figure 18: Prikaz časovnega razvoja valovne funkcije  $\Psi(x, t)$ , za  $\lambda = 1$ ,  $\gamma = 3$

Opazimo lahko, da postanejo v tem primeru 3D grafi zelo neberljivi, predvsem zato, ker se začne sama valovna funkcija sesedati za večje  $\lambda$  in tako verjetnost ni več Gaussove oblike, ampak se po daljšem času razleze čez cel prostor. Da bi to preprečili, bi lahko še bolj narezali časovno skalo, ampak bi tako program potreboval vedno več časa za samo izdelavo grafov. Vse animacije danih grafov si lahko pogledamo pri v datotekah gif z naslovom Prikaz razvoja lam=--- z odmikom gam=---

Pogledamo pa si še lahko odvisnosti od  $\gamma$  pri  $\lambda = 0$ .

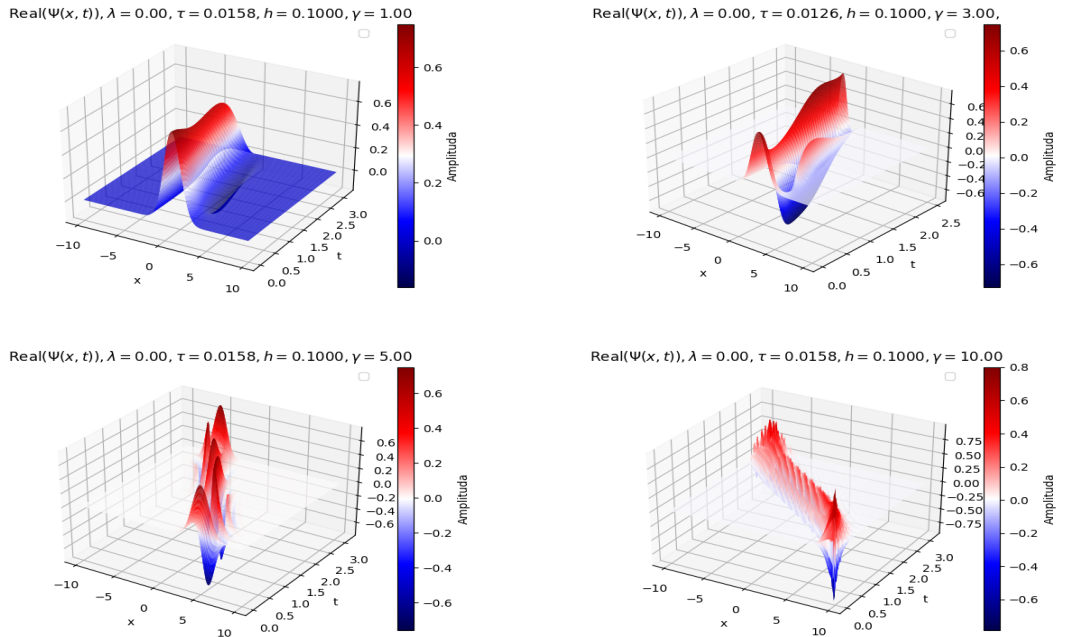


Figure 19: Prikaz časovnega razvoja valovne funkcije  $\Psi(x, t)$ , za  $\lambda = 0$ , pri različnih  $\gamma$

Opazimo lahko, da se nam kljub spreminjanju  $\gamma$  sam nihajni čas paketa okoli ničle ohranja. Tako morajo paketi, ki so bolj oddaljeni od središča se gibati hitreje kot pa tisti, ki imajo majhen  $\gamma$ . Seveda pa moramo biti previdni, da ne postavimo dele paketa na rob škatle, saj se nam tako začne ta sesuvati še pred začetkom časovnega razvoja, kar lahko dobro vidimo

na animaciji za  $\gamma = 10$ .