

Univerza v Ljubljani
Fakulteta *za matematiko in fiziko*



Časovni razvoj osnovnega stanja harmonskega oscilatorja v anharmonskem potencialu

Avtor: Simon Perovnik

Predavatelj: prof. dr. Tomaž Prosen

Asistent: Jaš Bensa

Prva domača naloga pri Višjih računskih metodah

Ljubljana, februar 2023

1 Uvod

Nestacionarno Schrödingerjevo enačbo zapišemo kot

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H\right)\psi(x, t) = 0. \quad (1)$$

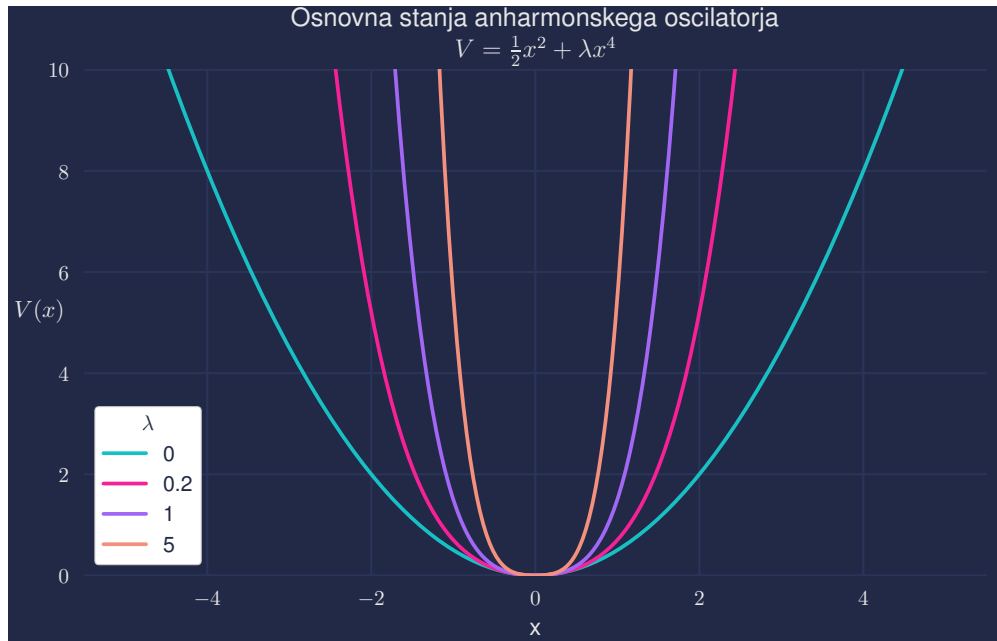
V nalogi bomo obravnavali časovni razvoj osnovnega stanja harmonskega oscilatorja, ki se bo sprva nahajal v harmonskem potencialu, nato pa bomo ob času $t = 0$ vklopili motnjo λ s čimer bo postal naš potencial anharmonski

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

Primer bomo obravnavali v eni dimenziji, zato bomo Hamiltonian zapisali kot

$$H = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x), \quad (3)$$

kjer smo celoten sistem normirali na način, da sta m in \hbar enaka 1. Potencial zapisani v enačbi (2) je za nekaj vrednosti parametra λ prikazan na sliki (1).



Slika 1: Anharmonski potencial za različne vrednosti parametra λ .

Za začetna stanja bomo vzeli kar lastna stanja harmonskega oscilatorja (2), za katere seveda velja, da bodo za $\lambda = 0$ v času ostala nespremenjena. V principu bi lahko uporabili katerokoli izmed lastnih stanj, a se bomo zaradi preprostosti osredotočili zgolj na primer ko je $N = 1$.



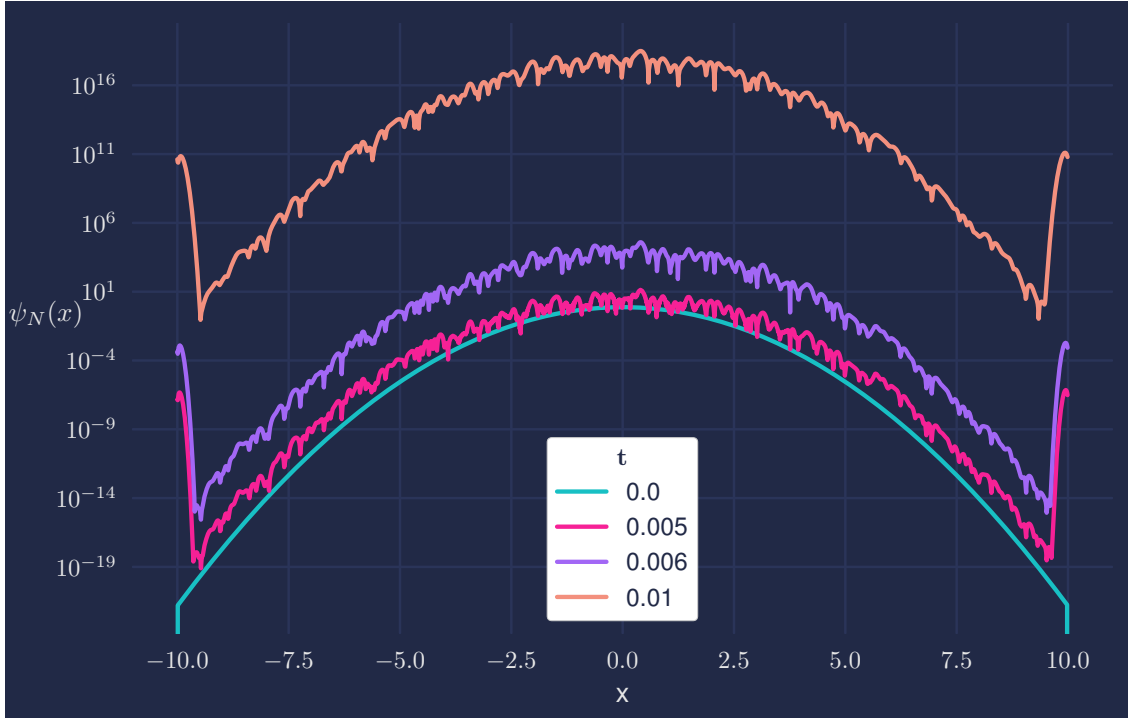
Slika 2: Lastna stanja harmonskega oscilatorja.

2 Časovna propagacija

Obstaja več načinov formulacije časovne propagacije funkcije, ki pa se med seboj razlikujejo v sami numerični stabilnosti. Najbolj enostavna shema vključuje uporabo končnih diferenc za zapis krajevnega odvoda, precej večjo stabilnost pa si lahko obetamo ob uporabi t.i. implicitne metode, ki si jo bomo pogledali v nadaljevanju. Metoda končnih diferenc sloni na zvezi

$$\psi_{m,n+1} = \psi_{m,n} + i\Delta t \left[\frac{\psi_{m+1,n} + \psi_{m-1,n} - 2\psi_{m,n}}{2(\Delta x)^2} - V_m \psi_{m,n} \right], \quad (4)$$

kjer smo uvedli $V_m := V(m\Delta x)$, Δx in Δt pa ustrezata diskretizaciji v domeni prostor-čas. Kot testni primer uporabe te metode si bomo pogledali časovno propagacijo lastnega stanja z $N = 0$, za primer ko je potencial kar harmonski, saj vem, da se takrat funkcija ne bi smela spreminjati v času.



Slika 3: Časovna propagacija z metodo končnih diferenc.

Po pričakovanjih se je metoda slabo obnesla, saj numerične napake hitro privedejo do povsem napačnih rezultatov (norma funkcije gre proti inf). Pojavijo se tako modulacije oblike funkcije kot splošen trend povečevanja vrednosti funkcije preko vseh meja. Opazimo lahko tudi povsem ne fizikalne numerične artefakte na robovih.

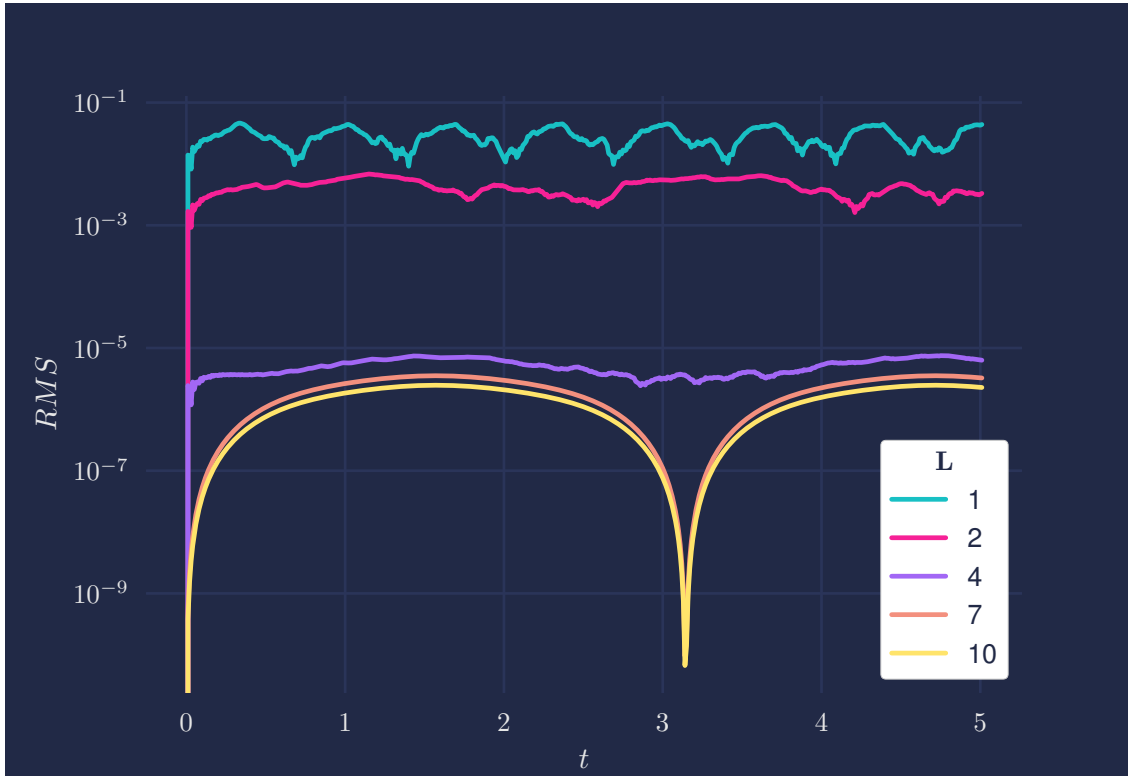
2.1 Implicitna shema

Ker se je metoda končnih diferenc izkazala za nestabilno, si bomo ogledali še tako imenovano implicitno shemo, ki je definirana z

$$\left(\left(I + i \frac{\Delta t}{2} H \right) \psi \right)_{m,n+1} = \left(\left(I - i \frac{\Delta t}{2} H \right) \psi \right)_{m,n} . \quad (5)$$

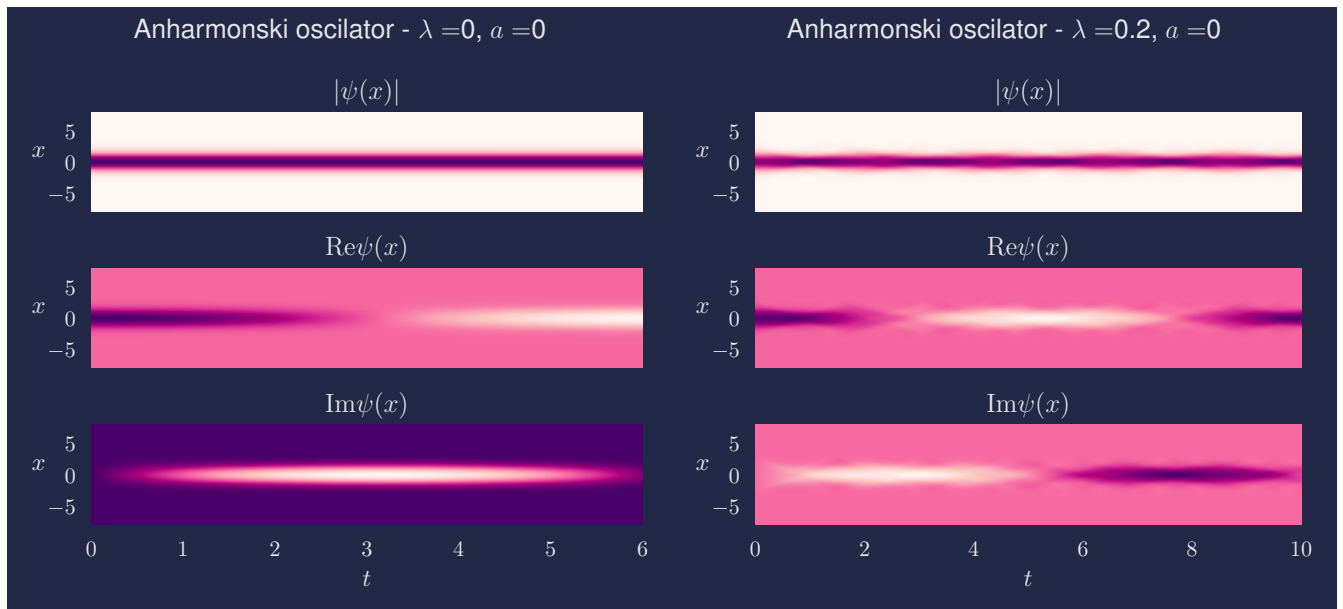
Znotraj te sheme lahko ponovno vpeljemo končne difference za definicijo drugega odvoda, kar nam da $H = \frac{D}{2(\Delta x)^2} + \text{diag}(V_m)$, kjer je D tridiagonalna matrika z vrednostmi -2 na diagonalni, in 1 na obeh sosednjih kvazi-diagonalah. Sistem $Ax_n = Bx_{n-1}$ se v programskem jeziku `Python` reši zelo enostavno z uporabo funkcije `linalg.solve` iz knjižnice `scipy`.

Ker bomo prostor za potrebe numeričnega reševanja diskretizirali in omejili, moramo pred samim numeričnim računanjem premisliti še, kako velik interval moramo vzeti, da ne bomo "izgubili" preveč funkcije na robovih. V ta namen primerjamo, kako se ob različnih vrednostih mej intervala L osnovno stanje harmonskega oscilatorja v potencialu, kjer je $\lambda = 0$ skozi čas razlikuje od začetne vrednosti. Z grafa (4) lahko ocenimo, da bo $L = 8$ primerna izbira. Opazimo pa lahko tudi, da se pri skoraj vsaki izbiri L -ja lahko odčita nekakšno periodo, s katero vrednost funkcije niha. Ker ni fizikalnega ozadja za takšen efekt, ga bomo označili kot numerični artefakt metode.

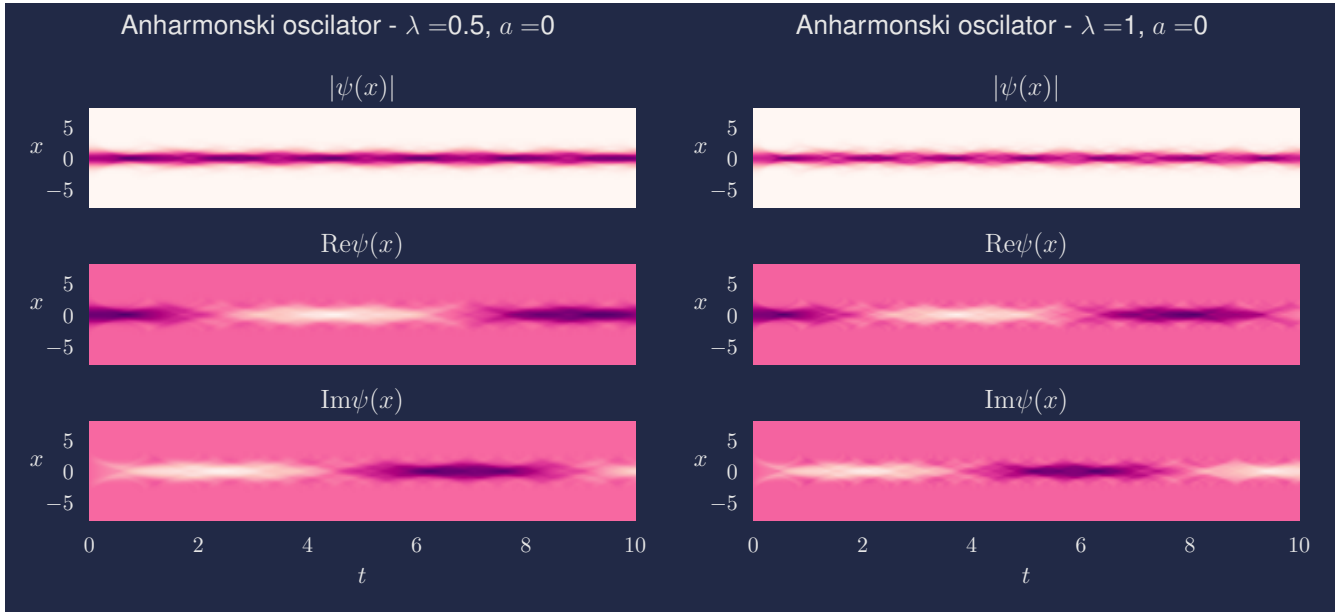


Slika 4: Odstopanja od začetnega stanja v harmonskem potencialu za različne velikosti intervala $[-L, L]$.

V nadaljevanju so prikazani rezultati časovne propagacije, kjer smo prostor diskretizirali na $\Delta x = 0.1$, časovni korak je znašal $\Delta t = 0.01$, ustavili pa smo se pri času $t = 10$.



Slika 5: Časovna propagacija za $\lambda = 0$ in $\lambda = 0.2$.

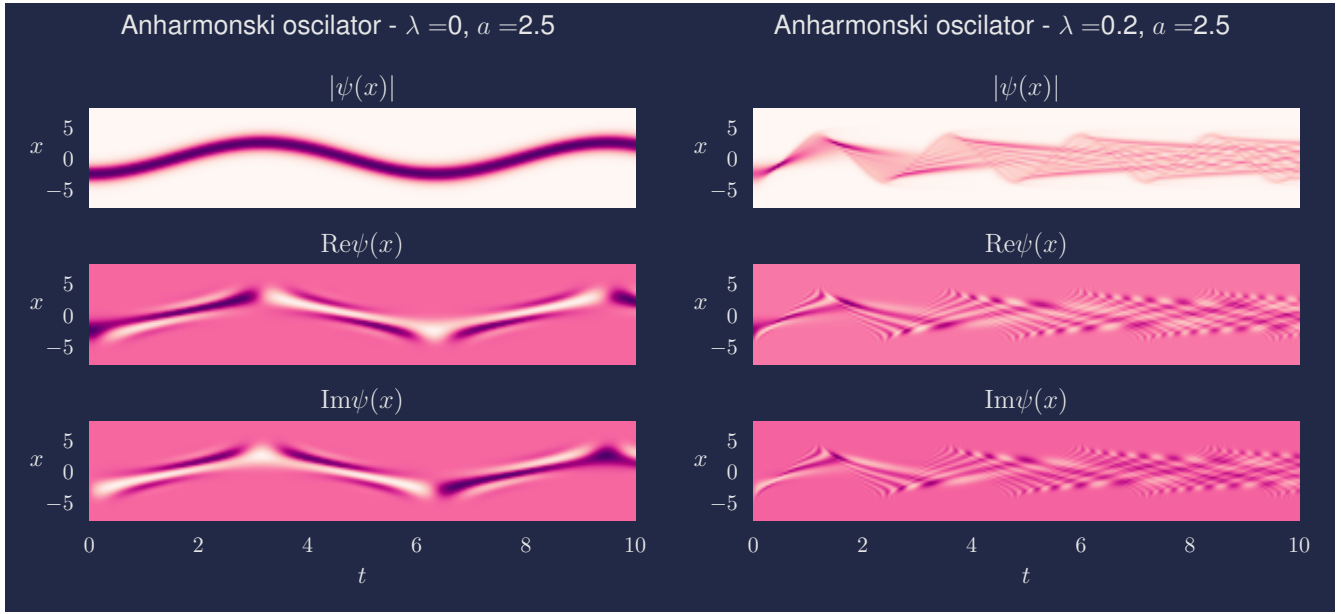


Slika 6: Časovna propagacija za $\lambda = 0.5$ in $\lambda = 1$.

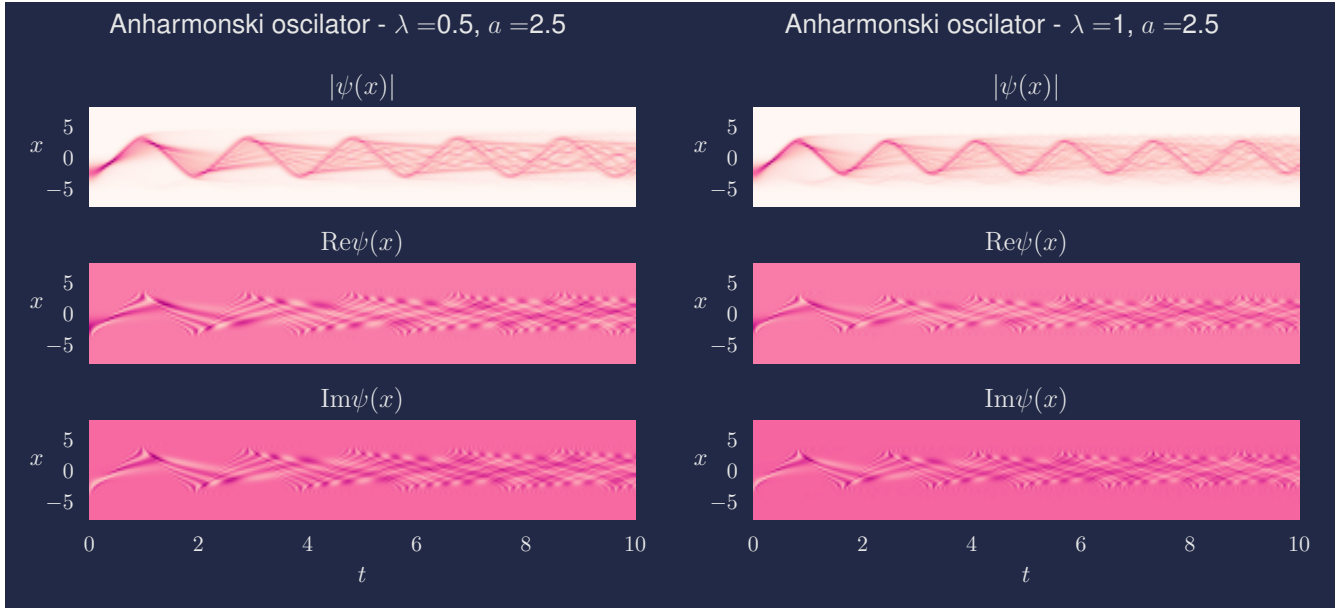
Vidimo, da začne stanje ob prisotnosti motnje λ nekoliko oscilirati okoli osnovne lege - večji kot je λ , tem hitrejšje so oscilacije. Kar je smiselno, saj je potencial vse močnejši in hitreje vrača stanje v ravnovesno lego. Če si pogledamo realno in imaginarno komponento, opazimo, da oscilirata ravno v fazi, ko zavzema ena najvišje vrednosti, zavzema druga najmanjše. To bi si lahko predstavljali, kot da se funkcija nekako preliva med tema dvema komponentama, njena norma pa ostaja vseskozi (do numerične natančnosti) enaka.

3 Časovna propagacija koherentnega stanja

Koherentno stanje je definirano kot premik lastnega stanja za vrednost a . Podobno kot prej lahko simuliramo časovno propagacijo sistema z implicitno shemo, kjer bomo uporabili enake parametre simulacije kot prej.



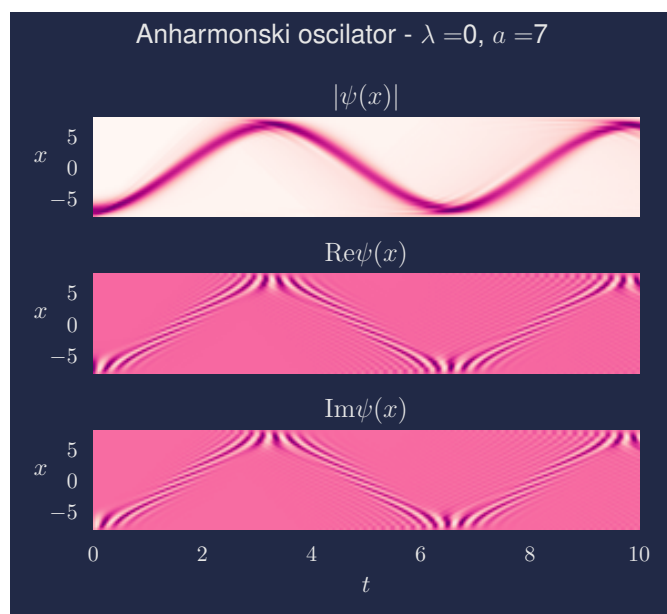
Slika 7: Časovna propagacija koherentnega stanja za $\lambda = 0$ in $\lambda = 0.2$.



Slika 8: Časovna propagacija koherentnega stanja za $\lambda = 0.5$ in $\lambda = 1$.

Izmik iz središčne lege je povzročil nihanje celotnega paketa valovne funkcije. Podobno kot prej, ob višanju vrednosti parametra λ , postajajo oscilacije vse hitrejšje. Opazimo tudi, da se sama vrednost valovne funkcije nekoliko razklopi v več prispevkov, ki oscilirajo z nekoliko drugačnimi fazami, kar vidimo kot zamazanost (najbolj očitna postane ob koncu intervalov), medtem ko večinski del stanj niha skupaj.

Pri vseh simulacijah smo izbrali $a = 2.5$, v želji, da bi bile oscilacije dobro vidne, a bi se izognili morebitnim napakam na robu, saj mora v principu veljati $L - a \gg 1$. Primer, ko temu pogoju ni zadoščeno, kar se najbolj jasno vidi predvsem v slikah obeh komponent valovne funkcije, je prikazan na sliki (9)



Slika 9: Časovna propagacija ob (pre)velikem izmiku a iz ravnovesne lege.