Numerieke Methoden
3de Bachelor Fysica

Practicum 11: De tijdsonafhankelijke Schrödinger-vergelijking

Contact: jeroen.mulkers@uantwerpen.be U.305

In dit laatste practicum zullen we de tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking oplossen voor een aantal eenvoudige problemen. Er bestaan uiteraard veel methoden om de Schrödingervergelijking numeriek op te lossen. Wij zullen hier twee methoden behandelen die beide een antwoord geven op de vraag: hoe zetten we het Schrödinger-eigenwaardenprobleem om in een matrix eigenwaardenprobleem.

1 'Finite-difference' methode

De één-dimensionale tijdsonafhankelijke Schrödingervergelijking wordt gegeven door

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{1}$$

Net zoals in de 4 vorige practica kunnen we een oplossing bekomen door deze differentiaalvergelijking te discretiseren:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_{i+1} + \psi_{i-1} - 2\psi_i}{h^2} + V(x_i)\psi_i = E\psi_i.$$

Dit leidt tot volgend eigenwaardenprobleem

$$H\tilde{\psi} = E\tilde{\psi}$$

met

$$\tilde{\psi} = (\psi_1\psi_2\ldots\psi_N),$$

met N het aantal gridpunten. Voor één-dimensionale problemen is de matrix H tridiagonaal. De eigenwaarden en eigenvectoren vindt men nu door de matrix H te diagonaliseren, dit kan m.b.v. de commando's `eig` en `eigs`.

Een script om zo'n eigenwaardeprobleem op te lossen zou volgende delen kunnen bevatten

1. Initialiseren van enkele variabelen zoals bv. het aantal gridpunten, het aantal te vinden eigenwaarden, ...
2. Opstellen van een (sparse) matrix H die de Hamiltoniaan voorstelt
3. Oplossen van het eigenwaardenprobleem m.b.v. `eigs`
4. Plotten van eigenwaarden en eigenfuncties

Opgave

1. Vind op deze manier de eigenwaarden en eigenstoestanden van een oneindig diepe put met breedte L. Merk hiervoor op dat de golffunctie $\tilde{\psi}$ slechts gedifiëerd is op het gekozen grid, en dus nul is daarbuiten. Neem als energie-eenhied de grondtoestandsenergie $E' = \hbar^2\pi^2/2mL^2$, en als lengte-eenheid $x' = L$. In deze eenheden is de lengte van de put 1 en wordt de Hamiltoniaan gegeven door

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{\pi^2}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{2}$$

met

$$V(x) = \begin{cases} 0, & |x| \leq 1/2 \\ \infty, & |x| > 1/2 \end{cases} \tag{3}$$

2. Vind op dezelfde manier de energieniveaus van de één-dimensionale harmonische oscillator. Neem als eenheden $E' = \hbar\omega_0$ en $x' = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$, wat wordt de Hamiltoniaan in dit geval? Plot ook de eigenfuncties.
3. Beschouw nu een potentiaalput met een eindige diepte. Bekijk het spectrum en de golffuncties voor verschillende dieptes.

2 Twee-dimensionale problemen

Deze methode kan uiteraard ook uitgebreid worden tot meerdere dimensies. Als voorbeeld behandelen we de twee-dimensionale harmonische oscillator met een 'finite difference' aanpak. We gaan de volgende Schrödingervergelijking dus oplossen op een grid:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}\right)\psi(x,y)+V(x,y)\psi(x,y)=E\psi(x,y), \tag{4}$$

met $V(x,y)=\frac{1}{2}m\omega_0^2(x^2+y^2)$. Discretisatie levert

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_{i+1,j}+\psi_{i-1,j}+\psi_{i,j+1}+\psi_{i,j-1}-4\psi_{i,j}}{h^2}+V(x_i,y_j)\psi_{i,j}=E\psi_{i,j}. \tag{5}$$

De discrete golffunctie hangt nu dus af van twee indices. Omdat we de golffunctie toch als een vector willen behandelen, moeten we een bepaalde ordening afspreken. We kiezen bv. $\psi_1 \equiv \psi_{1,1}, \psi_2 \equiv \psi_{1,2}, \ldots, \psi_{N_y} \equiv \psi_{1,N_y}, \psi_{N_y+1} \equiv \psi_{2,1}, \ldots, \psi_n \equiv \psi_{\text{floor}((n-1)/N_y)+1,n-(i-1)N_y}, \ldots$ De matrix $\mathbf{H}$ die nu moet gediagonaliseerd worden, zal nu niet meer tridiagonaal zijn (waarom?), maar nog steeds sparse.

Voor de liefhebbers:
Tracht de 'finite difference' methode te gebruiken om de golffuncties en energieniveaus te bepalen van een 2D harmonische oscillator. Je kan dit probleem overigens ook analytisch behandelen, vertrekkende van de oplossingen van het 1D probleem.