

Matematično-fizikalni praktikum

Avtor: Andraž Seničar

6. september 2024

Naloga 10: Začetni problem PDE - diferenčne metode

Datum: september 2024

1 Uvod

Enorazsežna nestacionarna Schödingerjeva enačba

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

je osnovno orodje za nerelativistični opis časovnega razvoja kvantnih stanj v različnih potencialih. Tu obravnavamo samo od časa neodvisne hamiltonske operatorje

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x).$$

Z menjavo spremenljivk $H/\hbar \mapsto H$, $x\sqrt{m/\hbar} \mapsto x$ in $V(x\sqrt{m/\hbar})/\hbar \mapsto V(x)$, efektivno postavimo $\hbar = m = 1$,

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

Razvoj stanja $\psi(x, t)$ v stanje $\psi(x, t + \Delta t)$ opišemo s približkom

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-iH\Delta t} \psi(x, t) \approx \frac{1 - \frac{1}{2}iH\Delta t}{1 + \frac{1}{2}iH\Delta t} \psi(x, t), \quad (2)$$

ki je unitaren in je reda $\mathcal{O}(\Delta t^3)$. Območje $a \leq x \leq b$ diskretiziramo na krajevno mrežo $x_j = a + j\Delta x$ pri $0 \leq j < N$, $\Delta x = (b - a)/(N - 1)$, časovni razvoj pa spremljamo ob časih $t_n = n\Delta t$. Vrednosti valovne funkcije in potenciala v mrežnih točkah ob času t_n označimo $\psi(x_j, t_n) = \psi_j^n$ oziroma $V(x_j) = V_j$. Krajevni odvod izrazimo z diferenco

$$\Psi''(x) \approx \frac{\psi(x + \Delta x, t) - 2\psi(x, t) + \psi(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2} = \frac{\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n}{\Delta x^2}.$$

Ko te približke vstavimo v enačbo (2) in razpišemo Hamiltonov operator po enačbi (1), dobimo sistem enačb

$$\psi_j^{n+1} - i\frac{\Delta t}{4\Delta x^2} [\psi_{j+1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1}] + i\frac{\Delta t}{2} V_j \psi_j^{n+1} = \psi_j^n + i\frac{\Delta t}{4\Delta x^2} [\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n] - i\frac{\Delta t}{2} V_j \psi_j^n,$$

v notranjih točkah mreže, medtem ko na robu ($j \leq 0$ in $j \geq N$) postavimo $\psi_j^n = 0$. Vrednosti valovne funkcije v točkah x_j uredimo v vektor

$$\Psi^n = (\psi_1^n, \dots, \psi_{N-1}^n)^T$$

in sistem prepišemo v matrično obliko

$$\mathbf{A}\Psi^{n+1} = \mathbf{A}^*\Psi^n, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} d_1 & a & & & & \\ a & d_2 & a & & & \\ & a & d_3 & a & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a & d_{N-2} & a \\ & & & & a & d_{N-1} \end{pmatrix},$$

kjer je

$$b = i\frac{\Delta t}{2\Delta x^2}, \quad a = -\frac{b}{2}, \quad d_j = 1 + b + i\frac{\Delta t}{2}V_j.$$

Dobili smo torej matrični sistem, ki ga moramo rešiti v vsakem časovnem koraku, da iz stanja Ψ^n dobimo stanje Ψ^{n+1} . Matrika \mathbf{A} in vektor Ψ imata kompleksne elemente, zato račun najlažje opraviš v kompleksni aritmetiki. Izkazuje se, da so za zadovoljivo natančnost višji redi nujni (glej dodatni del naloge).

2 Naloga

Želimo spremljati časovni razvoj začetnega stanja

$$\Psi(x, 0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} e^{-\alpha^2(x-\lambda)^2/2}$$

v harmonskem potencialu $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$, kjer je v naravnih enotah $\alpha = k^{1/4}$, $\omega = \sqrt{k}$. Analitična rešitev je koherentno stanje

$$\psi(x, t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}} \exp \left[-\frac{1}{2}(\xi - \xi_\lambda \cos \omega t)^2 - i \left(\frac{\omega t}{2} + \xi \xi_\lambda \sin \omega t - \frac{1}{4}\xi_\lambda^2 \sin 2\omega t \right) \right],$$

kjer je $\xi = \alpha x$, $\xi_\lambda = \alpha \lambda$. Postavi parametre na . Krajevno mrežo vpni v interval $[a, b] = [-40, 40]$ z $N = 300$ aktivnimi točkami. Nihajni čas je $T = 2\pi/\omega$ – primerno prilagodi časovni korak Δt in stanje opazuj deset period.

Opazuj še razvoj gaussovskega valovnega paketa

$$\psi(x, 0) = (2\pi\sigma_0^2)^{-1/4} e^{ik_0(x-\lambda)} e^{-(x-\lambda)^2/(2\sigma_0^2)}$$

v prostoru brez potenciala. Tu poznamo analitično rešitev, ki jo lahko zapišemo kot

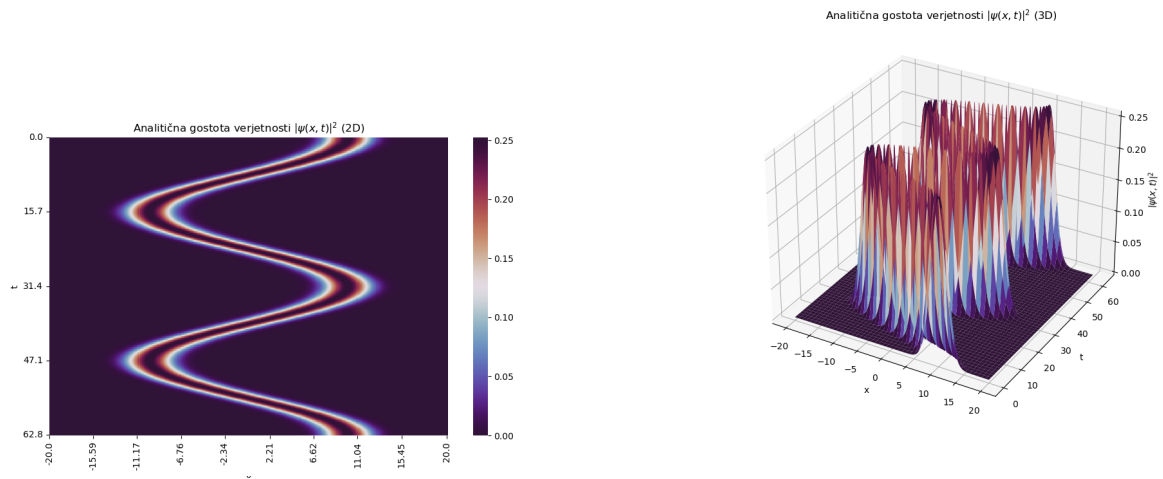
$$\psi(x, t) = \frac{(2\pi\sigma_0^2)^{-1/4}}{\sqrt{1 + it/(2\sigma_0^2)}} \exp \left[\frac{-(x - \lambda)^2/(2\sigma_0^2) + ik_0(x - \lambda) - ik_0^2 t/2}{1 + it/(2\sigma_0^2)} \right]$$

3 Reševanje

3.1 Valovni paket v harmonskem potencialu

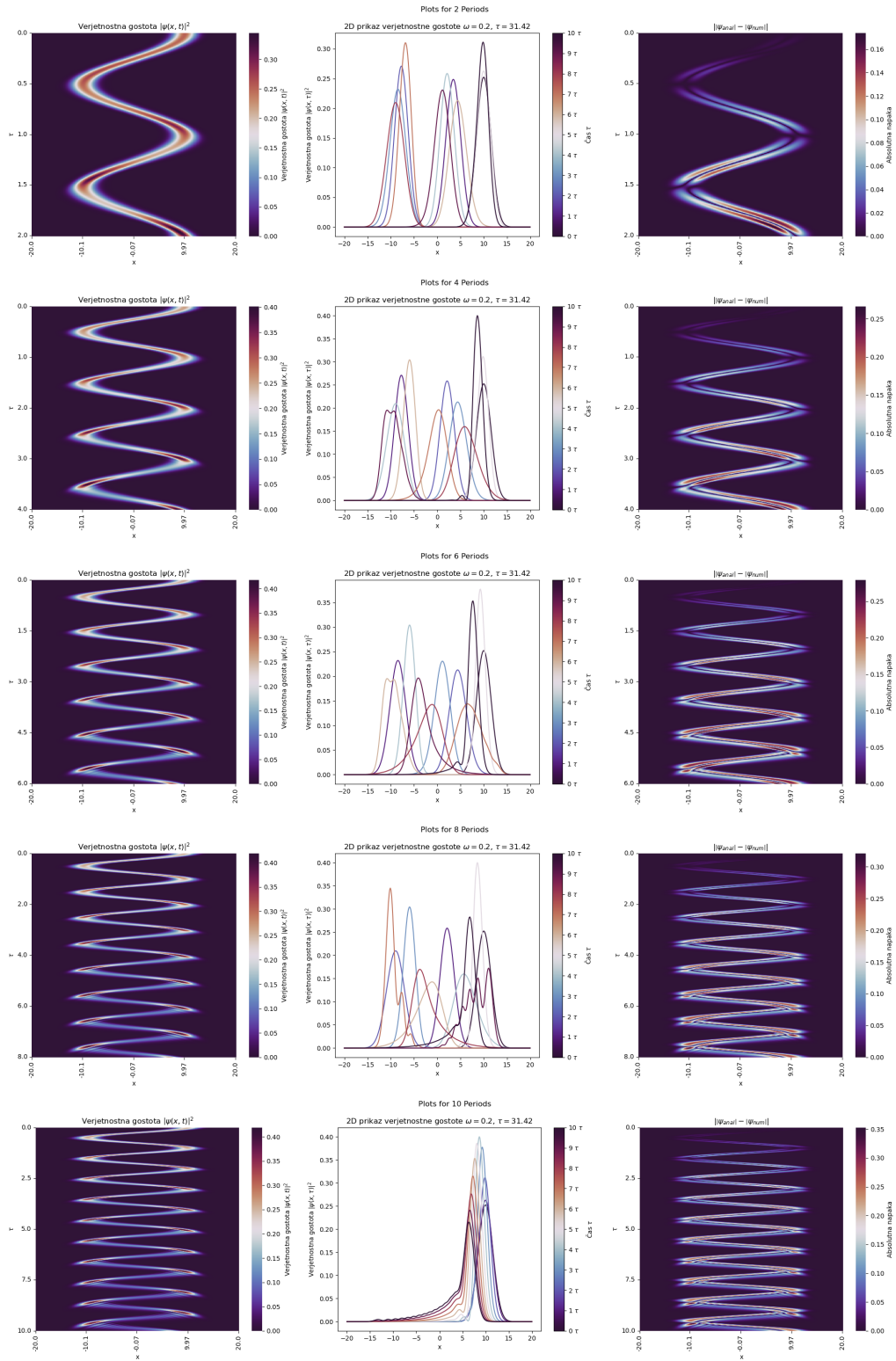
Za začetek sem se lotil reševanja problema harmonskega oscilatorja. Za začetno stanje sem vzel $\omega = 0.2$, $\lambda = 10$, $\alpha = \sqrt{k}$.

Analitično rešitev smo prikazali na spodnji sliki. Valovna funkcija oscilira okoli vrednosti 0.



Slika 1: Analitične rešitve gostote verjetnosti $|\psi(x, t)|^2$ v 2D in 3D

Sedaj pa lahko s metodo Crank-Nicolsove (sosšolka me je opozorila na napačno uporabo moške sklanjatve) izračunamo valovne funkcije pri različnih metodah. Ker pa imamo še analitično rešitev že znano bi bilo smiselno tudi preveriti koliko CN metoda odstopa od analitične.

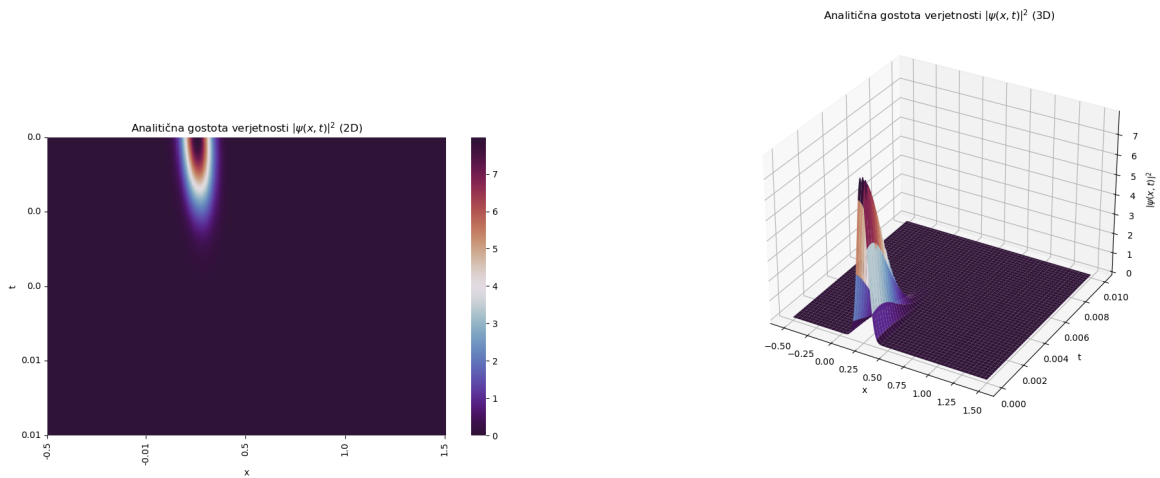


Slika 2: Prvi graf v vrsti prikazuje časovni razvoj koherentnega stanja(levo), drugi graf prikazuje Verjetnostna gostota za gaussov paket v harmoničnem potencialu, C-N približek v skrajnih legah za različno število period (sredi) in zadnji grah prikazuje absolutno napako naše metode(desno).

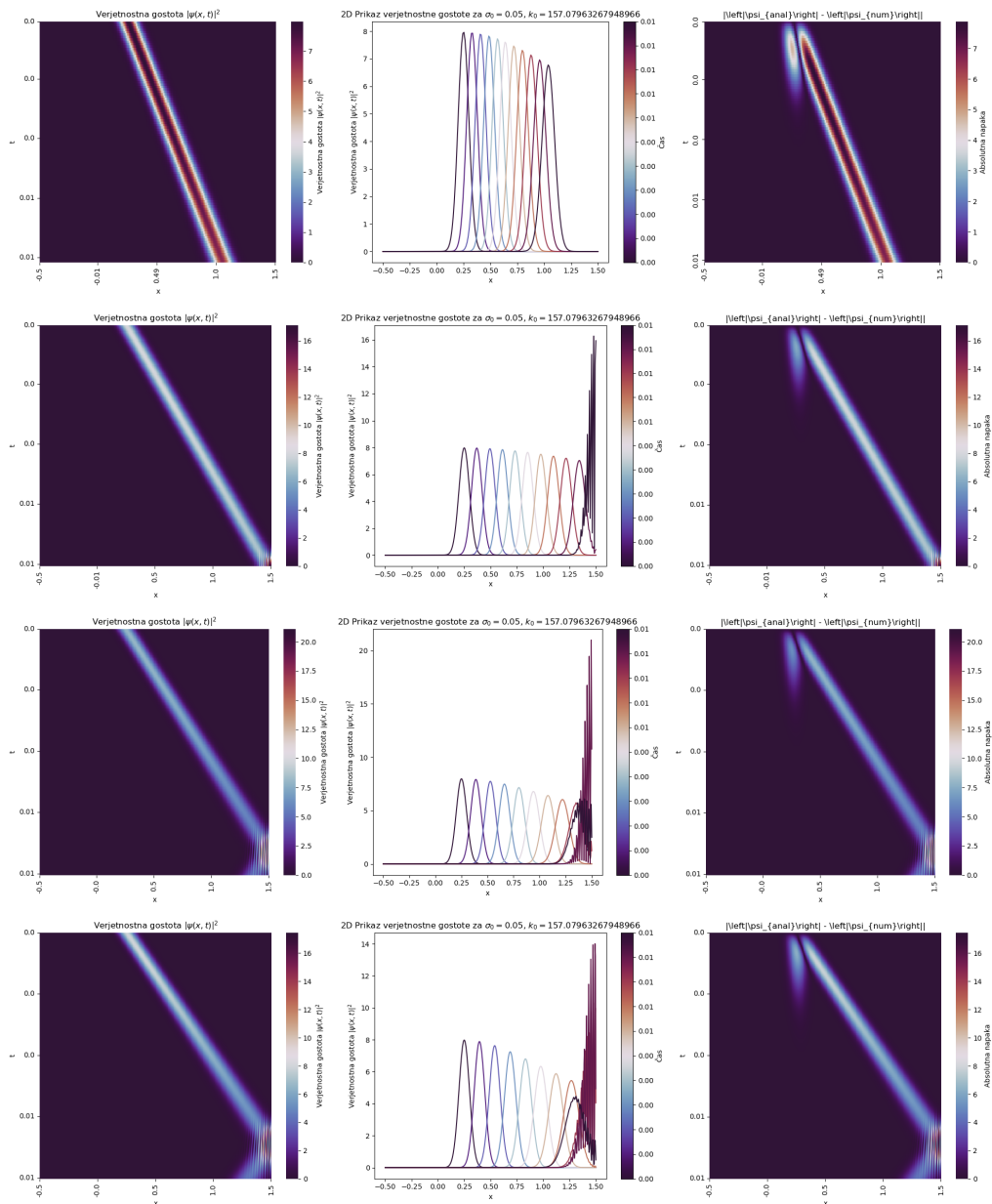
3.2 Gaussov valovni paket brez potenciala

Za začetno stanje vzamemo Gasussov valovni paket cantriran okoli $\lambda = 0.25$, s širino $\sigma_0 = 0.05$ in valovnim vektorjem $k_0 = 50\pi$. Analitično rešitev prikažemo spodaj. Vidimo, da je paket na začetku

koncentriran okoli λ in se s časom širi ter premika v desno. Tu je bila diskretizacija časa določena časovno, po formuli $\Delta t = 2\Delta x_2$. Tako je bila izbira vrednosti N edini parameter, ki je določal natančnost.



Slika 3: Analitične rešitve gostote verjetnosti za gaussov $|\psi(x, t)|^2$ v 2D in 3D



Slika 4: Različne rešitve za Gaussov valovni paket za različne vrednosti N

Prikažimo še to, da bolje razumemo, kaj se zgodi. Predvidemo lahko, da numerična metoda, na koncu intervala zazna rob, torej se paket odbije. To seveda ni pravilno, saj nam analitična rešitev pove, da se paket ne odbije na tem robu, vendar se še naprej razleže v neskončnost. Rešitev se za velike vrednosti N vseeno približuje analitični rešitvi, kar mi namiguje na to da je implementacija vseeno pravilna