Matematično-fizikalni praktikum

Avtor: Andraž Seničar

Naloga 8: Robni problem lastnih vrednosti

Datum: september 2024

1 Uvod

Pri robnem problemu lastnih vrednosti poznamo diferencialno enačbo in nekaj robnih pogojev (običajno vsaj toliko, kolikor je red enačbe) Za rešitev problema moramo v splošnem v enem zamahu določiti tako (lastne) funkcije, ki ustrezajo danim robnim pogojem, kot (lastne) vrednosti, ki skupaj zadoščajo diferencialni enačbi. Reševanje robnih problemov je zato lahko bistveno bolj zapleteno kot integracija začetnih problemov.

Numerično bomo reševali stacionarno Schrödingerjevo enačbo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi = E\psi$$

za neskončno potencialno jamo ($V(-a/2 < x < a/2) = 0$ in $V(|x| \geq a/2) \to \infty$) ter za končno potencialno jamo ($V(|x| \geq a/2) = V_0$), za kateri poznamo analitične rešitve; glej Strnad, *Fizika II*. Dva značilna pristopa, diferenčna metoda in strelska metoda, nas bosta pripravila na resnejše probleme, za katere analitičnih rešitev ne poznamo.

Pri *diferenčni metodi* razdelimo interval $[-a/2, a/2]$ na N točk ($x_i = -a/2 + ia/N$) in prepišemo drugi krajevni odvod v drugo diferenco, tako da ima brezdimenzijska enačba obliko

$$\frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{h^2} + E\psi_i = 0$$

oziroma

$$\psi_{i-1} - (2-\lambda)\psi_i + \psi_{i+1} = 0\,,$$

kjer je $\lambda = Eh^2 = k^2h^2$. Diskretizirati je treba tudi robna pogoja pri $x = -a/2$ in $x = a/2$, ki sta v splošnem (in tudi pri končni jami) mešanega tipa,

$$\begin{aligned} c_1\psi_0 + c_2\frac{\psi_1 - \psi_{-1}}{2h} &= 0\,, \\ d_1\psi_N + d_2\frac{\psi_{N+1} - \psi_{N-1}}{2h} &= 0\,, \end{aligned}$$

medtem ko sta pri neskončni jami preprostejša, $\psi_0 = \psi_N = 0$. V primerih potencialnih jam tako dobimo tridiagonalni sistem N oziroma $N-1$ linearnih enačb

$$A\underline{\psi} = \lambda\underline{\psi}$$

za lastne vektorje $\underline{\psi}$ in lastne vrednosti λ, ki ga rešujemo z diagonalizacijo.

Pri *strelski metodi* začnemo s "kosinusnim" začetnim pogojem v izhodišču $\psi(0) = 1$, $\psi'(0) = 0$ ali "sinusnim" pogojem $\psi(0) = 0$, $\psi'(0) = 1$, nato pa z nekim izbranim E diferencialno enačbo s poljubno integracijsko shemo (npr. RK4) integriramo do roba $x = a/2$ in tam preverimo, ali je izpolnjen drugi robni pogoj, $\psi(a/2) = 0$. Vrednost E spreminjamo tako dolgo, dokler robni pogoj ni izpolnjen do zahtevane natančnosti, in tako dobimo sode in lihe rešitve enačbe skupaj z ustreznimi lastnimi vrednostmi energije.

2 Naloga

Določi nekaj najnižjih lastnih funkcij in lastnih vrednosti za neskončno potencialno jamo z diferenčno metodo in metodo streljanja, lahko pa poskusiš še iterativno in s kakšno drugo metodo. Problem končne jame je s strelsko metodo le trivialna posplošitev problema neskončne jame: spremeni se le robni pogoj pri $x = a/2$, ki ima zaradi zahteve po zveznosti in zvezni odvedljivosti valovne funkcije zdaj obliko $c_1\psi(a/2) + c_2\psi'(a/2) = 0$. Kaj ima pri diferenčni metodi večjo vlogo pri napaki: končna natančnost diference, s katero aproksimiramo drugi odvod, ali zrnatost intervala (končna razsežnost matrike, ki jo diagonaliziramo)?

3 Reševanje

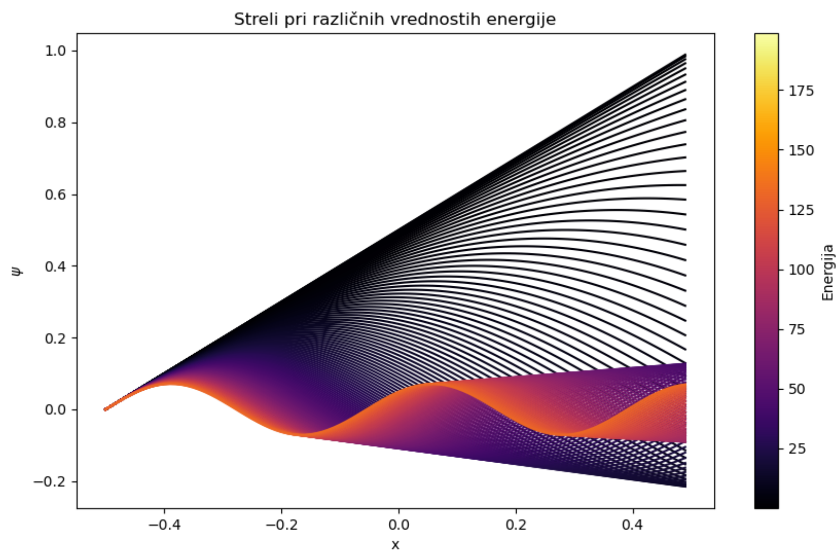
3.1 Neskončna potencialna jama

3.1.1 Strelska metoda

Začnimo z lažjim primerom neskončne potencialne jame. Preuredimo zgornjo diferencialno enačbo v sistem dveh diferencialnih enačb 1. reda. Upoštevamo tudi potencial, ki je enak 0 na željenem intervalu $|x| < a/2$:

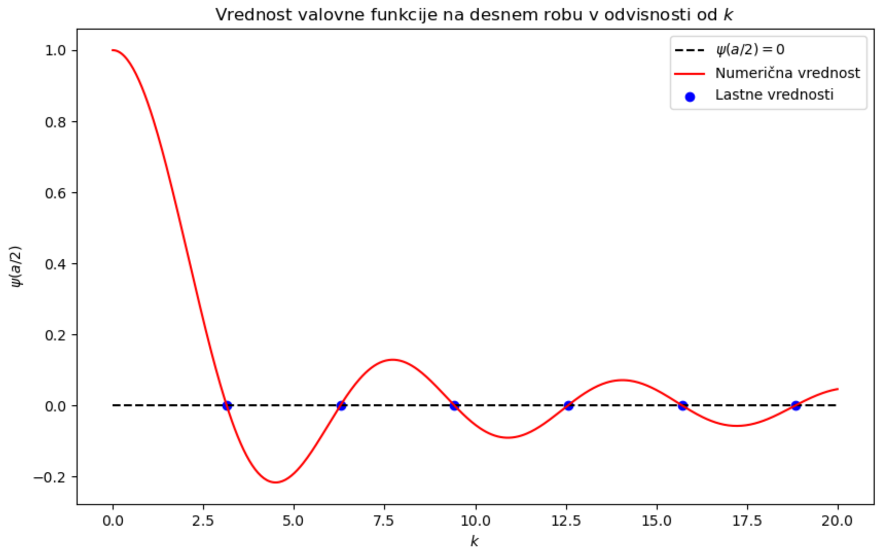
$$y_1' = y_2 \qquad y_2' = Ey_1$$

Rešimo zgornje enačbe z neko preverjeno metodo, npr. Runge-Kutta pri različnih vrednostih E. Dobimo veliko rešitev, ki ustrezajo začetnem pogoju, ki je v resnici robni pogoj na začetku.



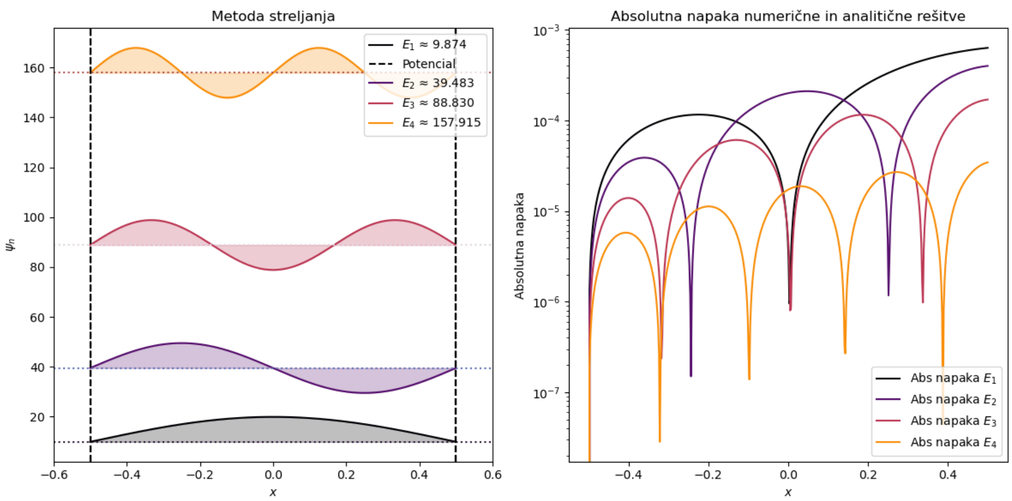
Slika 1: Streli pri različnih vrednostih energije

Kot opazimo, zgornje rešitve večinoma ne ustrezajo levem robnem pogoju, kar pa zahtevamo. Prikažimo torej rešitve v desnem robu v odvisnosti od energije delca. Opazimo, da funkcija seka abscisno os pri različnih energijah, katere lahko dobimo izračunamo preko bisekcije. Opazimo tudi, da so vrednosti zelo velike, to je, zato ker niso še normirane.



Slika 2: Energijska odvisnost rešitev enačbe v desnem robu

Sedaj, ko imamo kandidate za lastne energije sistema, lahko uporabimo sekantno metodo, da izračunamo končne vrednosti lastnih funkcij in energij, tako da ustrezajo robnim pogojem. S strelsko metodo smo izračunlai lastne funkcije ki jih sedaj lahko tudi prikažemo na grafu neskončne potencialne jame:

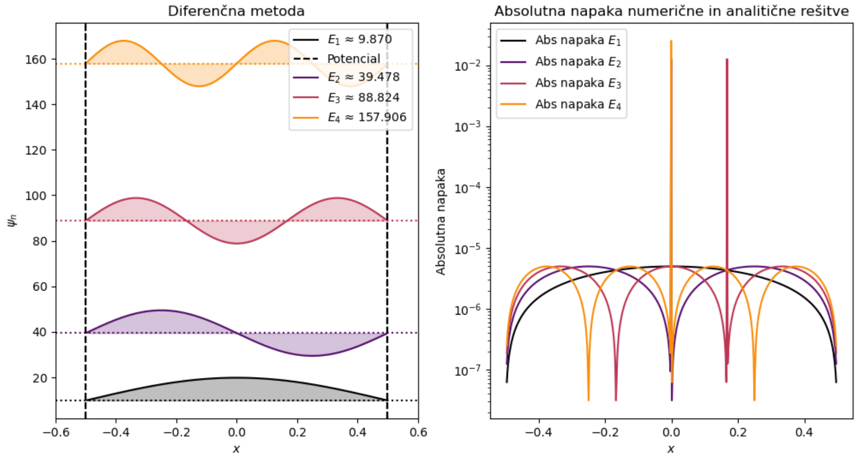


Slika 3: Prikaz lastnih energij s določenih s strelsko metodo (levo), prikaz napak aproksimacije lastnih energij v primerjavi z analitično rešitvijo (desno).

Tu je vredno še omeniti, da smo analitično rešitev dobili z že preverjeno metodo. V našem primeru RK4 metodo.

3.1.2 Diferenčna metoda

Po postopku opisanem v navodilih lahko enak prikaz naredimo še z metodo končnih diferenc.



Slika 4: Prikaz lastnih energij s določenih z metodo končnih diferenc (levo), prikaz napak aproksimacije lastnih energij v primerjavi z analitično rešitvijo (desno).

3.2 Končna potencialna jama

Na koncu si pogledamo še rešitve končne potencialne jame. Tu sem za reševanje uporabil le diferenčno metodo. Vidimo, da se rezultati ujemajo z teoretičnimi, saj dobimo v jami sinusne/kosinusne valove, izven nje, kjer je potencial večji od energije delca, pa eksponetno padanje.