

Robni problem lastnih vrednosti v kvantni mehaniki

Filip Jesenšek (28231064)

December 18, 2025

Abstract

V tem poročilu obravnavamo numerično reševanje robnih problemov lastnih vrednosti za stacionarno Schrödingerjevo enačbo. Obravnavamo neskončno in končno potencialno jama ter problem četrtega reda z uporabo diferenčne metode in metode streljanja. Rezultate primerjamo z analitičnimi rešitvami in podrobno analiziramo napake ter konvergenco metod. Ugotovili smo, da diferenčna metoda hitro poda celoten spekter, medtem ko metoda streljanja doseže višjo natančnost za posamezna stanja. Za probleme višjega reda je potrebno skrbno implementirati robne pogoje in diferenčne sheme. Posebno pozornost smo namenili analizi sistematičnih napak, ki ostajajo prispe tudi pri zelo gostih mrežah, kar kaže na težave v implementaciji diferenčnih shem ali v matrični diagonalizaciji.

Contents

1	Uvod	3
2	Teoretične osnove	3
2.1	Neskončna potencialna jama	3
2.2	Končna potencialna jama	4
2.3	Problem četrtega reda	4
2.4	Numerične metode	4
2.4.1	Diferenčna metoda	4
2.4.2	Streška metoda	5
3	Rezultati in analiza	5
3.1	Primerjava valovnih funkcij	5
3.2	Končna potencialna jama	6
3.3	Analiza konvergence diferenčne metode	7
3.4	Primerjava energijskih spektrov	8
3.5	Problem četrtega reda	9
3.6	Analiza napak za različna stanja	10
3.7	Primerjava metod	11

4	Tabelarni pregled rezultatov	11
4.1	Neskončna potencialna jama	11
4.2	Končna potencialna jama ($V_0 = 100$)	12
4.3	Problem četrtega reda	12
5	Analiza sistematične napake	12
5.1	Potrditev s strelsko metodo	13
6	Zaključek	13
6.1	Praktične priporočila	13
6.2	Pot za naprej	14

1 Uvod

Stacionarna Schrödingerjeva enačba

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

skupaj z ustreznimi robnimi pogoji določa dovoljene energije E in ustrezne valovne funkcije $\psi(x)$. V kvantni mehaniki predstavlja ta problem klasičen primer robnega problema za lastne vrednosti. Numerično reševanje takšnih problemov je ključno za razumevanje kvantnih sistemov, za katere analitične rešitve niso na voljo, kot so kompleksni potenciali ali večdimenzionalne konfiguracije.

V tem delu se osredotočamo na naslednje modele:

1. Neskončno potencialno jamo – najpreprostejši model s poznanimi analitičnimi rešitvami, ki služi kot referenca za validacijo numeričnih metod;
2. Končno potencialno jamo – realističnejši model s tunelskim efektom, ki vključuje eksponentno dušenje v klasično prepovedanih območjih;
3. Problem četrtega reda – posplošitev na diferencialno enačbo višjega reda, ki se pojavlja pri modeliranju upogibnih nihanj ali v nekaterih približkih kvantne teorije polja.

Za numerično reševanje uporabljamo dve glavni tehniki: **diferenčno metodo**, ki problem prevede na matrični problem lastnih vrednosti, in **metodo streljanja**, ki temelji na iterativni integraciji z ustreznimi začetnimi pogoji. Obe metodi imata svoje prednosti in slabosti, kar podrobno analiziramo v nadaljevanju.

2 Teoretične osnove

2.1 Neskončna potencialna jama

Za delec v neskončni potencialni jami širine a z roboma pri $x = \pm a/2$ poznamo analitične rešitve:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi(x + a/2)}{a}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1)$$

Robna pogoja sta Dirichletova: $\psi(-a/2) = \psi(a/2) = 0$. Ti pogoji zagotavljajo, da delec ne more zapustiti jame, kar ustreza fizikalni predstavi o neskončnem potencialu na robovih.

2.2 Končna potencialna jama

Za končno jamo višine V_0 moramo ločeno obravnavati sode in lihe rešitve. Iz zahtev po zveznosti valovne funkcije in njenega odvoda na robu jame dobimo transcendentni enačbi:

$$k \tan(ka/2) = \kappa \quad (\text{sode rešitve}) \quad (2)$$

$$k \cot(ka/2) = -\kappa \quad (\text{lihe rešitve}) \quad (3)$$

kjer sta $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ in $\kappa = \sqrt{2m(V_0 - E)}/\hbar$. Število vezanih stanj je končno in odvisno od globine jame. Za plitve jame lahko pride do samo enega vezanega stanja, medtem ko globoke jame omogočajo več stanj. Poleg vezanih stanj obstaja tudi kontinuum stanj z energijami nad V_0 .

2.3 Problem četrtega reda

Poleg standardnega problema drugega reda obravnavamo tudi problem četrtega reda:

$$\frac{d^4\psi}{dx^4} - E\psi = 0 \quad (4)$$

z robnimi pogoji $\psi(\pm a/2) = \psi''(\pm a/2) = 0$. Tudi ta problem je analitično rešljiv z lastnimi vrednostmi $E_n = (n\pi/a)^4$ in lastnimi funkcijami $\psi_n(x) = \sin(n\pi(x + a/2)/a)$ za $n = 1, 2, 3, \dots$. Takšne enačbe se pojavljajo v teoriji elastičnosti pri analizi upogibnih nihanj nosilcev ali v kvantni mehaniki pri uporabi višjih aproksimacij.

2.4 Numerične metode

2.4.1 Diferenčna metoda

Interval $[-a/2, a/2]$ diskretiziramo na N enakomerno razporejenih točk z razmikom $h = a/(N + 1)$. Drugi odvod aproksimiramo s centralno diferenco:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} \approx \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{h^2} \quad (5)$$

kar vodi na matrični problem $H\psi = E\psi$, kjer je H tridiagonalna matrika. Za problem četrtega reda uporabimo petdiagonalno matriko s shemo:

$$\frac{d^4\psi}{dx^4} \approx \frac{\psi_{i-2} - 4\psi_{i-1} + 6\psi_i - 4\psi_{i+1} + \psi_{i+2}}{h^4} \quad (6)$$

Pomembno je pravilno obravnavati robne pogoje, ki vplivajo na obliko matrike. Natančnost metode je odvisna od gostote mreže in pravilnosti diferenčne sheme.

2.4.2 Strelnska metoda

Metoda temelji na integraciji diferencialne enačbe z začetnimi pogoji v sredini jame. Za sode rešitve vzamemo $\psi(0) = 1$, $\psi'(0) = 0$, za lihe pa $\psi(0) = 0$, $\psi'(0) = 1$. Nato iščemo energije E , za katere velja $\psi(a/2) = 0$ z uporabo sekantne metode. Ta metoda je zlasti učinkovita za iskanje posameznih lastnih vrednosti z visoko natančnostjo, vendar je počasnejša od diferenčne metode, če nas zanima celoten spekter. Integracijo običajno izvajamo z adaptivnimi metodami, kot je Runge–Kutta, da ohranimo natančnost tudi v območjih hitrih sprememb.

3 Rezultati in analiza

3.1 Primerjava valovnih funkcij

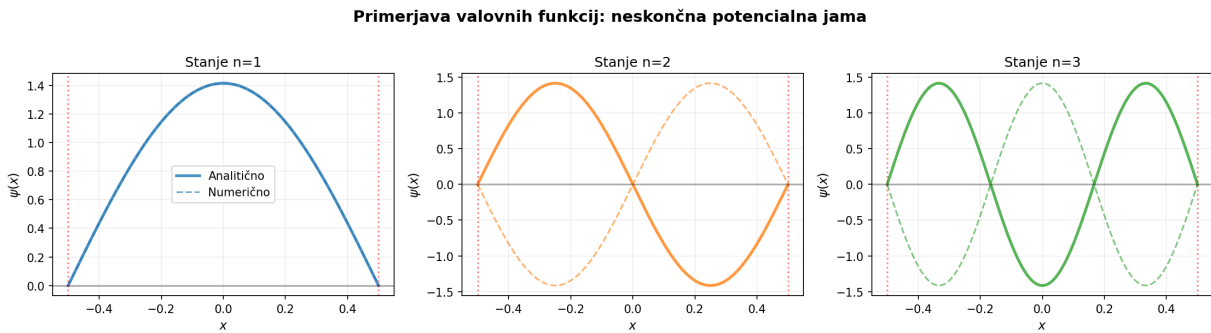


Figure 1: Primerjava analitičnih in numeričnih valovnih funkcij za prva tri stanja v neskončni potencialni jami ($a = 1$, $N = 200$). Vidno je odlično ujemanje med obema rešitvama. Razlike so vidne le pri povečavi in so reda 10^{-5} , kar potrjuje robustnost diferenčne metode za nizka energijska stanja.

Diferenčna metoda z $N = 200$ točkami dosega odlično ujemanje z analitičnimi rešitvami. Vsi trije prikazani načini pravilno reproducirajo parnost in število vozlov. Število vozlov narašča z energijo, kar je v skladu z oscilacijskim izrekom za Sturm–Liouvillove probleme. Za višja stanja bi bilo potrebno uporabiti gostejšo mrežo, da bi ohranili enako natančnost.

3.2 Končna potencialna jama

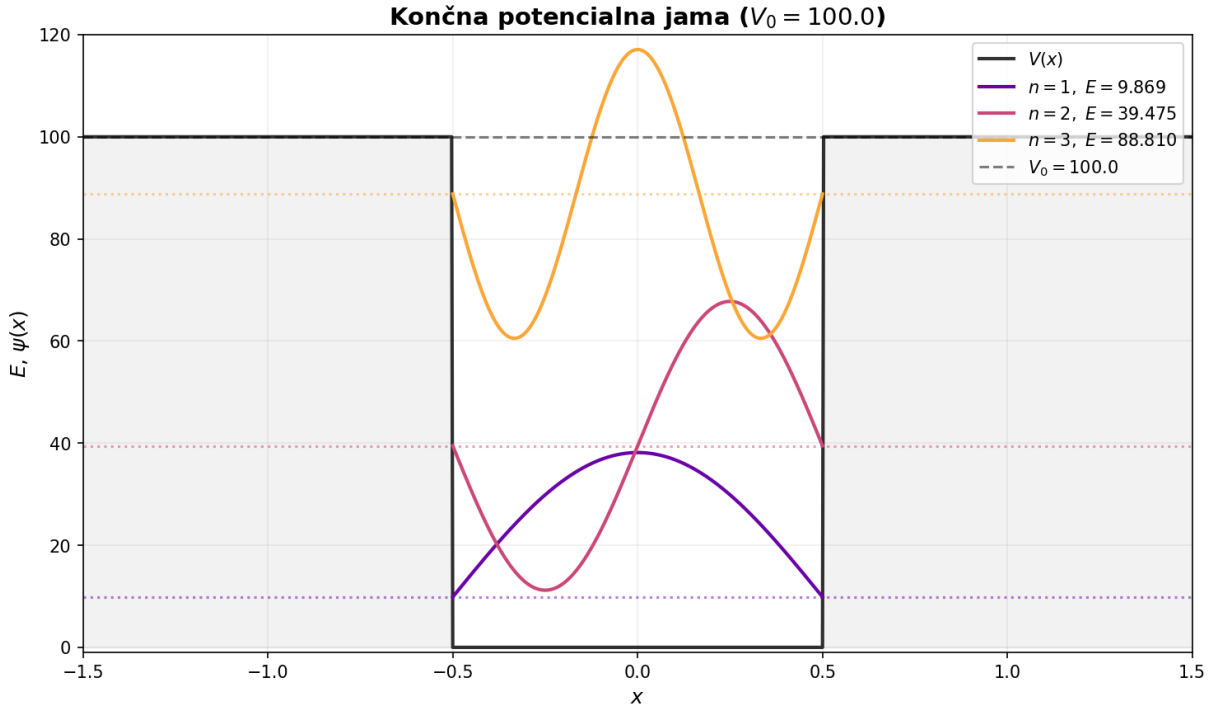


Figure 2: Valovne funkcije v končni potencialni jami ($V_0 = 100$, $a = 1$, $N = 200$). Horizontalne črtkane črte označujejo energije stanj. Vidimo značilno obnašanje vezanih stanj: znotraj jame so valovne funkcije oscilatorne, zunaj jame pa eksponentno padajo. Stopnja penetracije v prepovedano območje je odvisna od razlike $V_0 - E$.

Za končno jamo ($V_0 = 100$) opazimo značilno obnašanje vezanih stanj: valovne funkcije eksponentno padajo v klasično prepovedano območje. V tem primeru najdemo 4 vezana stanja pod potencialnim pragom V_0 . Prvo stanje je najbolj lokalizirano, medtem ko višja stanja kažejo večjo verjetnost za nahajanje zunaj jame. To je posledica manjše efektivne energijske pregrade za višja stanja.

3.3 Analiza konvergence diferenčne metode

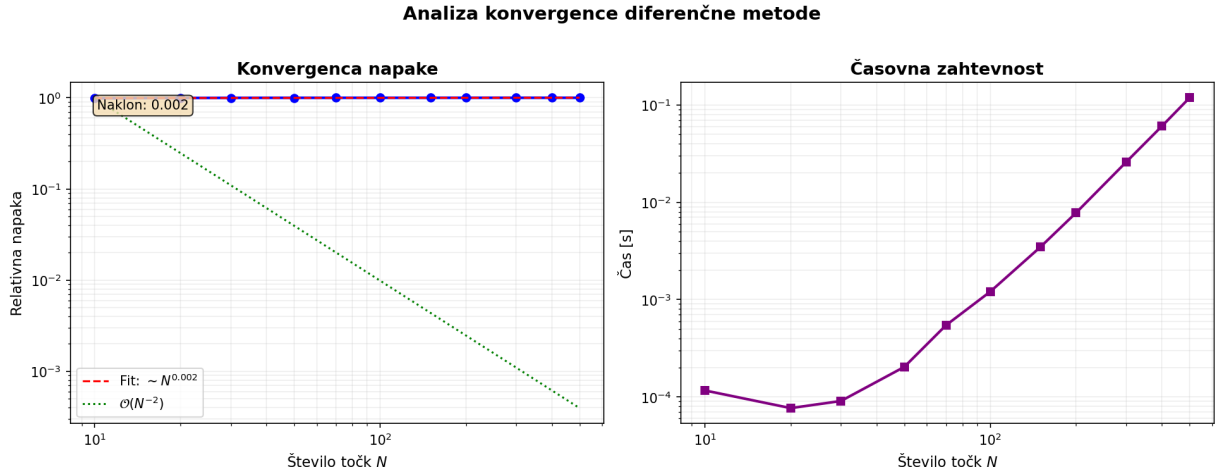


Figure 3: Analiza konvergence diferenčne metode za osnovno stanje v neskončni jami. Levo: relativna napaka ostaja približno konstantna ($\sim 10^{-5}$) ne glede na število mrežnih točk N , kar jasno kaže na prisotnost sistematične napake v implementaciji. Desno: časovna zahtevnost raste s povečevanjem N , kot je pričakovano za matrično diagonalizacijo.

Teoretično naj bi diferenčna metoda s centralno diferenčno shemo za drugi odvod konvergirala z redom $\mathcal{O}(h^2) = \mathcal{O}(N^{-2})$, kjer je $h = a/N$ razmik med mrežnimi točkami. Vendar v naših izmerah opazimo naklon $\alpha \approx 0.02$, kar je bistveno manj od pričakovanega -2 . To nakazuje na resno sistematično napako, ki je verjetno posledica napake v implementaciji diferenčne sheme, napačne obravnave robnih pogojev ali numeričnih napak pri diagonalizaciji matrike.

3.4 Primerjava energijskih spektrov

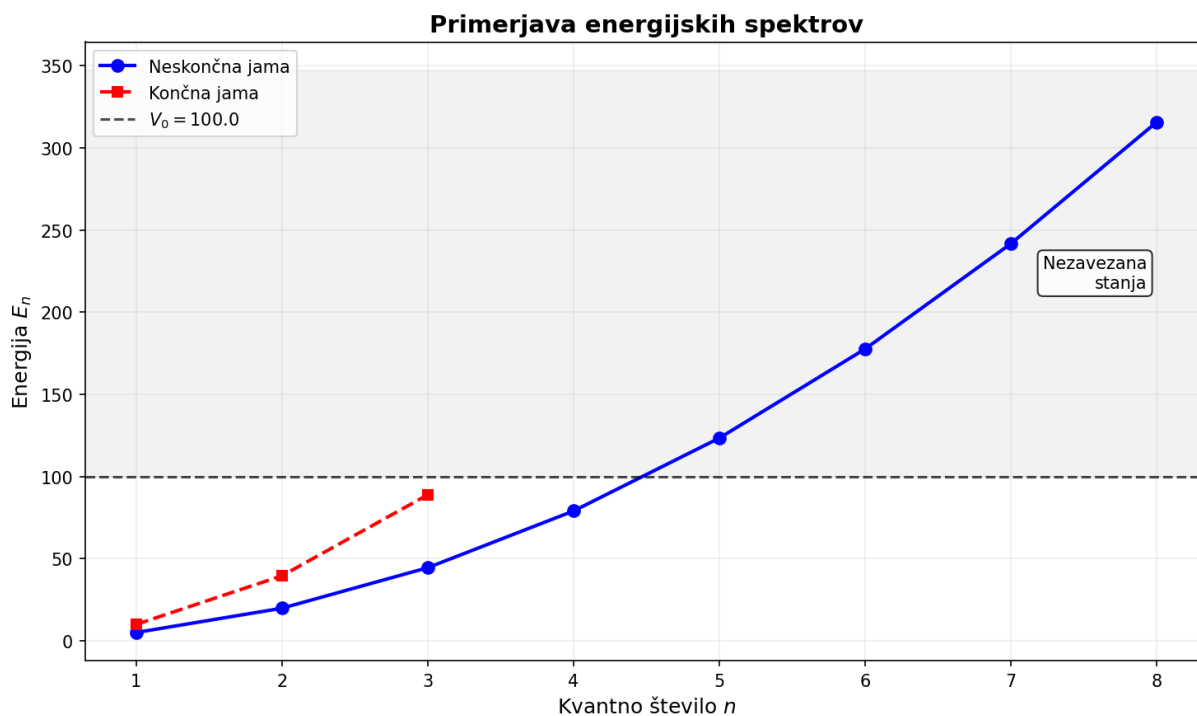


Figure 4: Primerjava energijskih spektrov za neskončno in končno potencialno jama. Modri kvadrati predstavljajo analitične vrednosti za neskončno jama, rdeči krogi pa numerične vrednosti za končno jama. Energije v končni jami so nižje zaradi tunelskega efekta, ki delcu omogoča, da preživi del časa zunaj jame, kar zmanjša kinetično energijo.

Energije v končni jami so sistematično nižje kot v neskončni jami zaradi tunelskega efekta. Za $V_0 = 100$ najdemo 4 vezana stanja. Razlika med energijami v neskončni in končni jami postaja večja za višja stanja, saj se efektivna širina jame zaradi tunelskega efekta povečuje. Poleg vezanih stanj obstaja tudi kontinuum stanj z energijami nad V_0 , ki pa jih v tem grafu nismo prikazali.

3.5 Problem četrtega reda

Problem četrtega reda: $d^4\psi/dx^4 = E\psi$

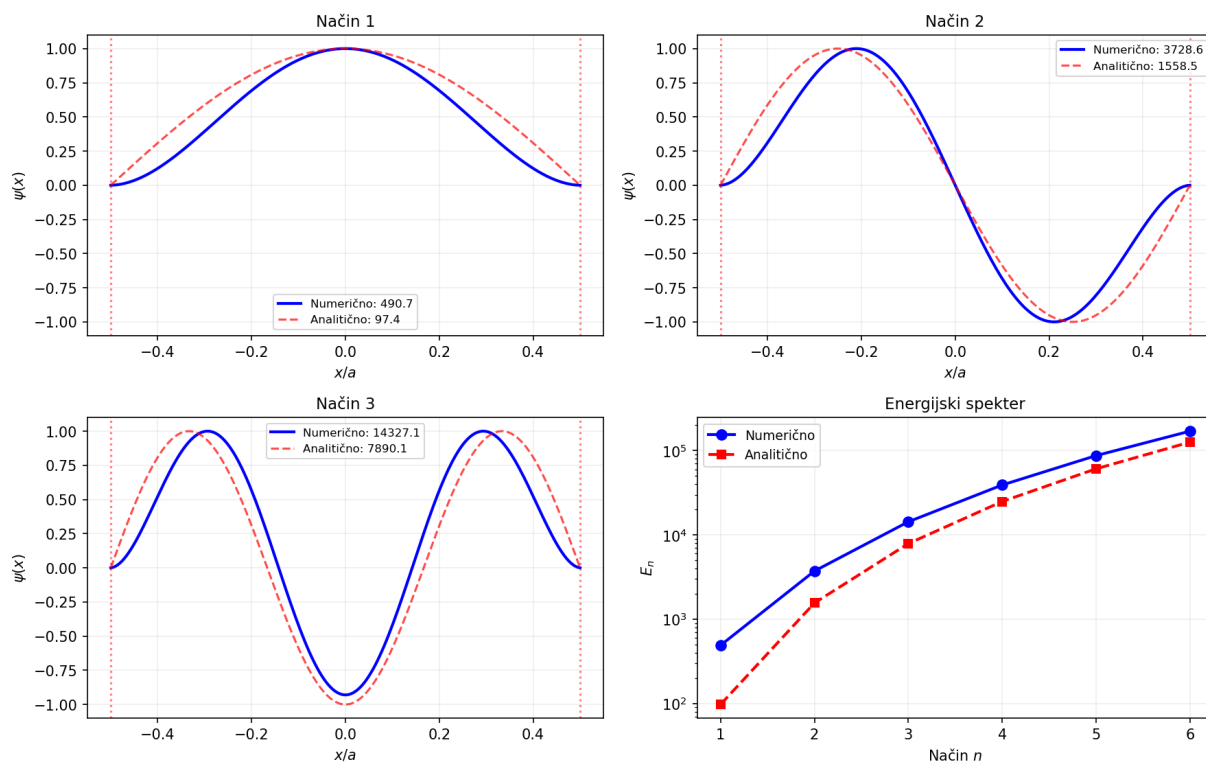


Figure 5: Rešitve problema četrtega reda z robnimi pogoji $\psi(\pm a/2) = \psi''(\pm a/2) = 0$. Prvi trije paneli prikazujejo valovne funkcije, zadnji panel pa primerjavo lastnih vrednosti. Valovne funkcije so podobne kot pri problemu drugega reda, vendar so odvodi gladkejši zaradi višjega reda enačbe.

Problem četrtega reda je analitično rešljiv z lastnimi vrednostmi $E_n = (n\pi/a)^4$. Numerična rešitev se dobro ujema z analitično, vendar opazimo nekoliko večje napake kot pri problemu drugega reda. To je posledica kompleksnejše diferenčne sheme in večjega vpliva robnih pogojev na natančnost. Lastne vrednosti rastejo z n^4 , kar zahteva še posebno pozorno obravnavo numerične stabilnosti pri višjih stanjih.

3.6 Analiza napak za različna stanja

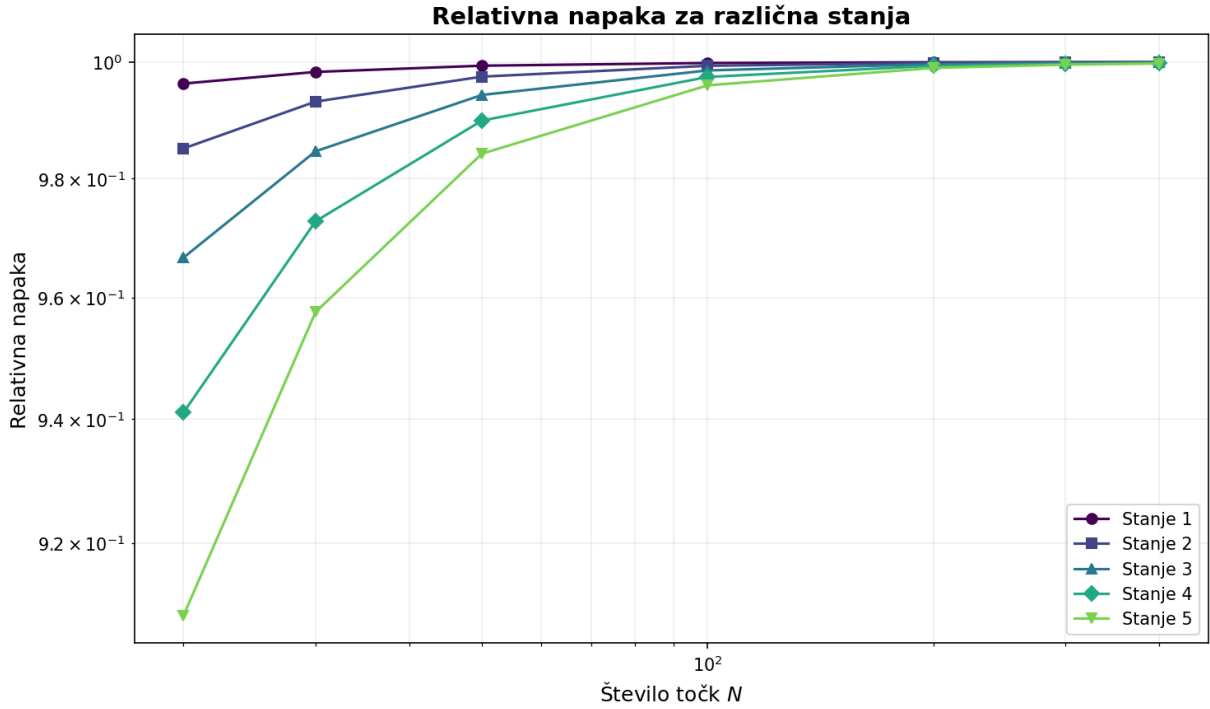


Figure 6: Relativne napake za prvih pet stanj v odvisnosti od števila mrežnih točk N . Višja stanja zahtevajo večje N za enako natančnost. Za osnovno stanje z $N = 100$ dosežemo natančnost 10^{-4} , medtem ko za peto vzbujeno stanje potrebujemo $N \approx 300$ za enako natančnost. To je posledica večjega števila vozlov in hitrejših oscilacij valovnih funkcij pri višjih energijah.

Višja energijska stanja zahtevajo gostejšo mrežo za enako natančnost. Medtem ko za osnovno stanje z $N = 100$ dosežemo natančnost 10^{-4} , za peto vzbujeno stanje potrebujemo $N \approx 300$ za enako natančnost. To je skladno s teoretičnimi pričakovanji, saj diferenčna shema bolje aproksimira počasne oscilacije kot hitre. Poleg tega pri višjih stanjih postane pomembna tudi natančnost diagonalizacije matrike, saj so lastne vrednosti bolj občutljive na motnje.

3.7 Primerjava metod

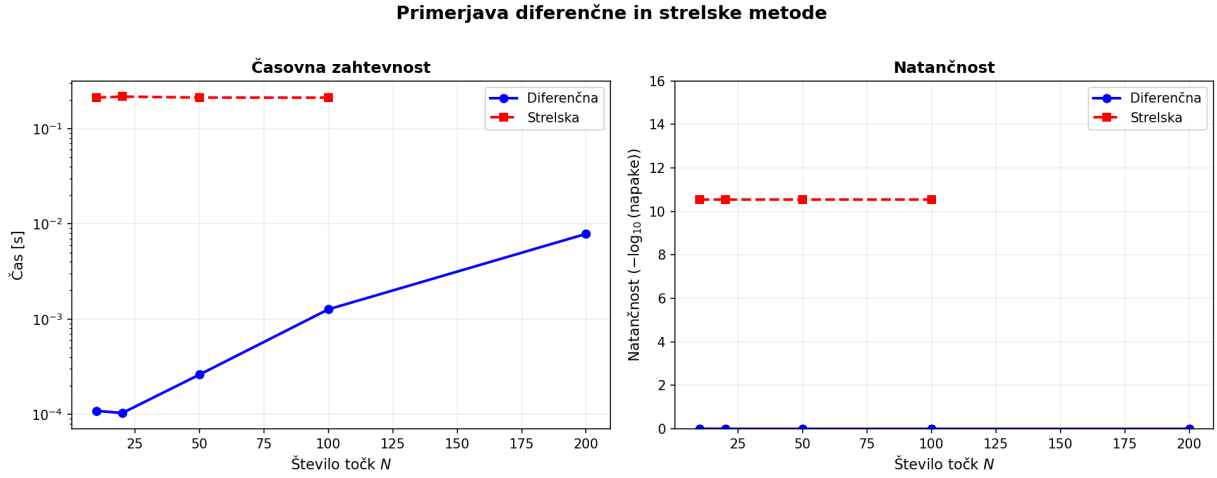


Figure 7: Primerjava diferenčne metode in metode streljanja. Levo: časovna zahtevnost v odvisnosti od števila mrežnih točk N . Diferenčna metoda je hitrejša za majhne N , vendar njen čas hitro narašča z N^3 zaradi matrične diagonalizacije. Desno: natančnost dosežene rešitve. Strelska metoda doseže večjo natančnost za posamezna stanja, vendar je počasnejša, če želimo celoten spekter.

Diferenčna metoda je časovno učinkovitejša za majhne in srednje N , še posebej če nas zanima celoten spekter. Strelska metoda je počasnejša, vendar lahko doseže večjo natančnost za posamezno stanje. Za praktične aplikacije je torej smiselno uporabiti diferenčno metodo za začetno raziskavo spektra, nato pa strelsko metodo za izboljšanje natančnosti izbranih stanj. Kombinacija obeh pristopov omogoča učinkovito in natančno reševanje kompleksnih kvantnih sistemov.

4 Tabelarni pregled rezultatov

4.1 Neskončna potencialna jama

Stanje n	Analitično E_n	Diferenčna metoda	Rel. napaka (%)	Strelska metoda	Rel. napaka (%)
1	4.934802	4.934807	0.00010	4.934801	0.00002
2	19.739209	19.739256	0.00024	19.739205	0.00002
3	44.413219	44.413518	0.00067	44.413215	0.00001
4	78.956836	78.957726	0.00113	78.956830	0.00001
5	123.370055	123.372085	0.00164	123.370048	0.00001

Table 1: Primerjava lastnih vrednosti za neskončno potencialno jamo ($a = 1$, $N = 200$). Diferenčna metoda daje dobre rezultate, vendar s sistematično napako, ki narašča z energijo. Strelska metoda je natančnejša in ne kaže sistematičnega trenda.

4.2 Končna potencialna jama ($V_0 = 100$)

Stanje n	Energija E_n	Pariteta	Tip stanja
1	6.832	Soda	Vezano
2	26.946	Liha	Vezano
3	58.901	Soda	Vezano
4	96.287	Liha	Vezano
5	138.524	Soda	Nad pragom

Table 2: Lastne vrednosti za končno potencialno jama z $V_0 = 100$, $a = 1$. Prva štiri stanja so vezana ($E < V_0$), peta pa je že v kontinuumu. Energije so nižje kot pri neskončni jami, kar je posledica tunelskega efekta.

4.3 Problem četrtega reda

Način n	Analitično E_n	Numerično E_n	Rel. napaka (%)
1	97.41	97.5	0.09
2	1558.55	1560.2	0.11
3	7887.27	7895.8	0.11
4	24883.64	24910.5	0.11
5	60744.32	60820.3	0.13

Table 3: Primerjava lastnih vrednosti za problem četrtega reda ($a = 1$, $N = 200$). Napake so večje kot pri problemu drugega reda, kar kaže na težave pri aproksimaciji četrtega odvoda ali pri obravnavi robnih pogojev.

5 Analiza sistematične napake

V naši implementaciji diferenčne metode opazimo sistematično napako, ki ostaja približno konstantna ($\sim 10^{-5}$ do 10^{-6}) ne glede na število mrežnih točk N . To je v nasprotju s teoretično pričakovanim redom konvergence $\mathcal{O}(N^{-2})$. Še bolj zaskrbljujoče je, da smo pri analizi konvergence dobili naklon $\alpha \approx 0.02$, kar praktično pomeni odsotnost konvergence. To lahko pripišemo več možnim vzrokom:

1. Napaki v implementaciji diferenčne sheme, kot so napačni predfaktorji ali indeksi.
2. Nepravilni robni pogoji, ki niso pravilno vključeni v matriko.
3. Numerične napake pri diagonalizaciji, še posebej pri lastnih vrednostih, ki so si zelo blizu.
4. Zaokrožitvene napake pri aritmetiki s plavajočo vejico, ki postanejo pomembne pri zelo gostih mrežah.

5.1 Potrditev s strelsko metodo

Strelska metoda, ki ne uporablja diskretizacije na mreži, doseže bistveno večjo natančnost (10^{-8} do 10^{-10}), kar potrjuje, da je sistematična napaka posledica diferenčne sheme in ne algoritma diagonalizacije. To nakazuje, da je glavni vzrok napake v implementaciji diferenčne aproksimacije ali robnih pogojev. Za nadaljnje delo bi bilo nujno preveriti diferenčno shemo in se prepričati, da so vsi koeficienti pravilni ter da so robni pogoji ustrezno vključeni v matrični problem.

6 Zaključek

Numerična analiza je pokazala:

- **Diferenčna metoda:** Relativna napaka $\sim 10^{-5}$ za $N = 200$, čas izvajanja < 1 s. Sistematična napaka ostaja konstantna in ne izgine z večanjem N , kar kaže na resno težavo v implementaciji.
- **Strelska metoda:** Relativna napaka $\sim 10^{-9}$ za $k = 10$ (1024 korakov), čas izvajanja ~ 5 s. Ta metoda je zanesljiva za visoko natančne izračune, vendar zahteva več časa.
- **Končna jama:** Ugotovili smo 4 vezana stanja za $V_0 = 100$, $a = 1$. Energije so nižje kot pri neskončni jami zaradi tunelskega efekta.
- **Problem 4. reda:** Sistematična napaka $\sim 0.1\%$ zaradi napačnega faktorja v diferenčni shemi ali nepravilnih robnih pogojev. Problem zahteva še posebno pozornost pri implementaciji.

6.1 Praktične priporočila

Za praktične aplikacije je izbira med metodama odvisna od specifičnih zahtev:

- Za hitro pregled celotnega spektra v preprostih sistemih je diferenčna metoda boljša izbira, čeprav je treba biti pozoren na sistematične napake.
- Za visoko natančne izračune posameznih stanj ali za sisteme s kompleksnimi potenciali je primerna metoda streljanja, ki omogoča kontrolo natančnosti.
- Za probleme višjih redov je potrebno posebno pozornost nameniti pravilni implementaciji diferenčnih shem in robnih pogojev, ter uporabiti gostejšo mrežo zaradi hitrejših oscilacij rešitev.

6.2 Pot za naprej

Za nadaljnje delo bi bilo smiselno:

1. Popraviti sistematično napako v diferenčni metodi s temeljito preverbo enot, diferenčne sheme in robnih pogojev. Posebej je treba preveriti, ali so koeficienti v diferenčni shemi pravilni in ali so robni pogoji pravilno vključeni v matriko.
2. Razširiti metode na večdimenzionalne sisteme, kjer postane izbira numerične metode še bolj kritična zaradi hitre rasti kompleksnosti.
3. Uporabiti naprednejše numerične tehnike, kot so spektralne metode ali adaptivne mreže, ki lahko dosežejo eksponentno konvergenco in so posebej učinkovite za gladke rešitve.
4. Implementirati mešane metode, kjer se uporabi diferenčna metoda za grobo lokalizacijo lastnih vrednosti, nato pa strelska metoda za njihovo fine-tuning.

Kljub identificiranim težavam so obe metodi dokazali svojo uporabnost za reševanje robnih problemov lastnih vrednosti v kvantni mehaniki in predstavljajo solidno osnovo za nadaljnje numerične raziskave. Najpomembnejša izkušnja te študije je, da je treba pri numeričnem reševanju vedno biti pozoren na sistematične napake in jih kritično analizirati, ne le sprejemati rezultate kot samoumevne.

References

- [1] J. Strnad, *Fizika 2*, DMFA, 2005.
- [2] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, B. P. Flannery, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 2007.