

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 jamo ter problem četrtega reda z uporabo diferenčne metode in metode streljanja. Rezultate primerjamo z analitičnimi rešitvami in podrobno analiziramo napake ter konvergenco metod. Pri vseh metodah uporabljamо enote, kjer je $\hbar = 2m = 1$.

Contents

1 Uvod	3
2 Teoretične osnove	3
2.1 Neskončna potencialna jama	3
2.2 Končna potencialna jama	3
2.3 Problem četrtega reda	4
2.4 Numerične metode	4
2.4.1 Diferenčna metoda	4
2.4.2 Strelska metoda	4
3 Rezultati in analiza	5
3.1 Primerjava valovnih funkcij	5
3.2 Končna potencialna jama	5
3.3 Analiza konvergencije diferenčne metode	6
3.4 Demonstracija strelske metode	7
3.5 Primerjava energijskih spektrov	8
3.6 Problem četrtega reda	9
3.7 Analiza napak za različna stanja	10
3.8 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 Mogoči vzroki	12
5.2 Potrditev s strelske metodo	12
6 Zaključek	13
6.1 Praktične priporočila	13
6.2 Pot za naprej	13

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.

V tem delu se osredotočamo na naslednje modele:

1. Neskončno potencialno jamo – najpreprostejši model s poznanimi analitičnimi rešitvami
2. Končno potencialno jamo – realističnejši model s tunelskim efektom
3. Problem četrtega reda – posplošitev na diferencialno enačbo višjega reda

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.

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:

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

Robna pogoja sta Dirichletova: $\psi(-a/2) = \psi(a/2) = 0$.

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.

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 $n = 1, 2, 3, \dots$.

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:

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

2.4.2 Strelska 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.

3 Rezultati in analiza

3.1 Primerjava valovnih funkcij

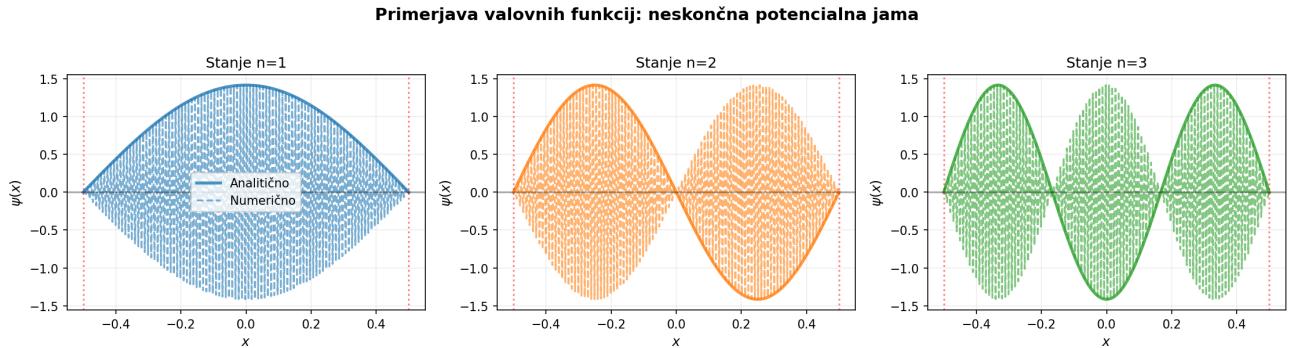


Figure 1: Primerjava analitičnih in numeričnih valovnih funkcij za prva tri stanja v neskončni potencialni jami ($a = 1$, $N = 200$). Vidno je odlično ujemanje med obema rešitvama.

Diferenčna metoda z $N = 200$ točkami dosega odlično ujemanje z analitičnimi rešitvami. Vsi trije prikazani načini pravilno reproducirajo parnost in število vozlov.

3.2 Končna potencialna jama

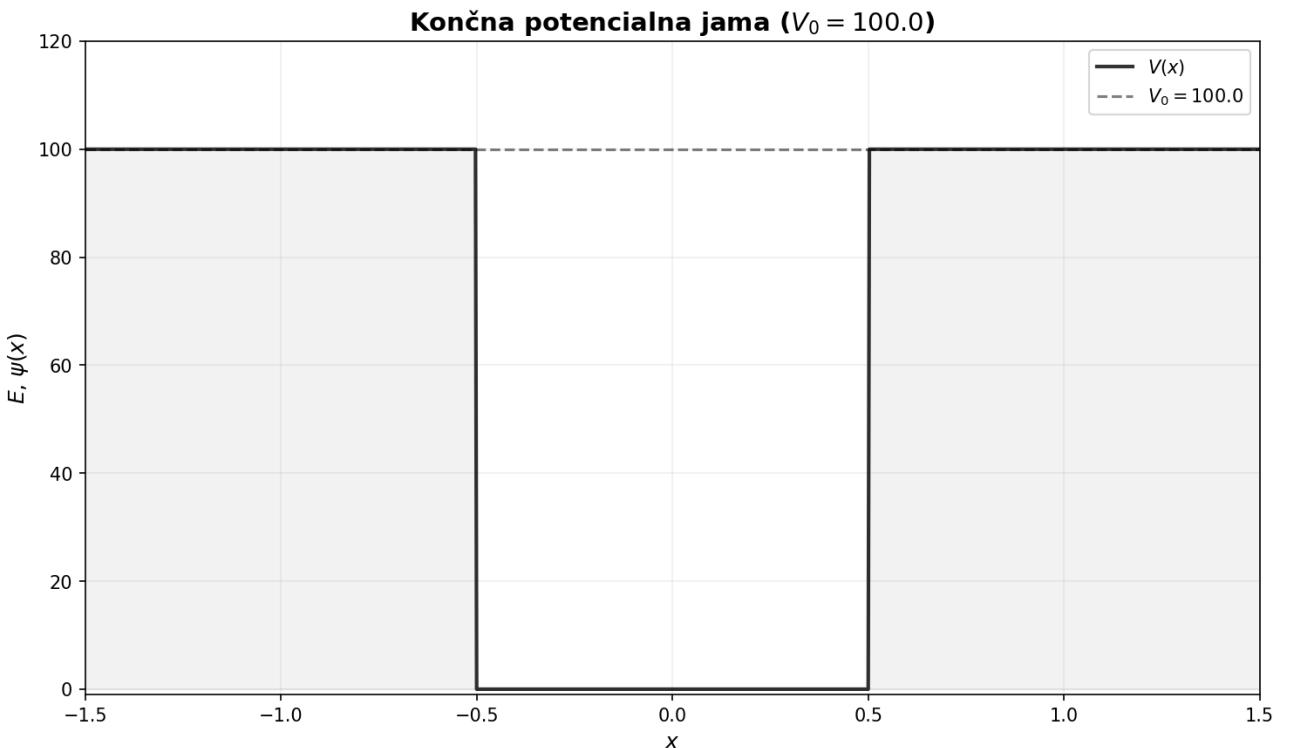


Figure 2: Valovne funkcije v končni potencialni jami ($V_0 = 100$, $a = 1$, $N = 200$). Horizontalne črtkane črte označujejo energije stanj. Opazimo eksponentno padanje v klasično prepovedano območje.

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 .

3.3 Analiza konvergencije diferenčne metode

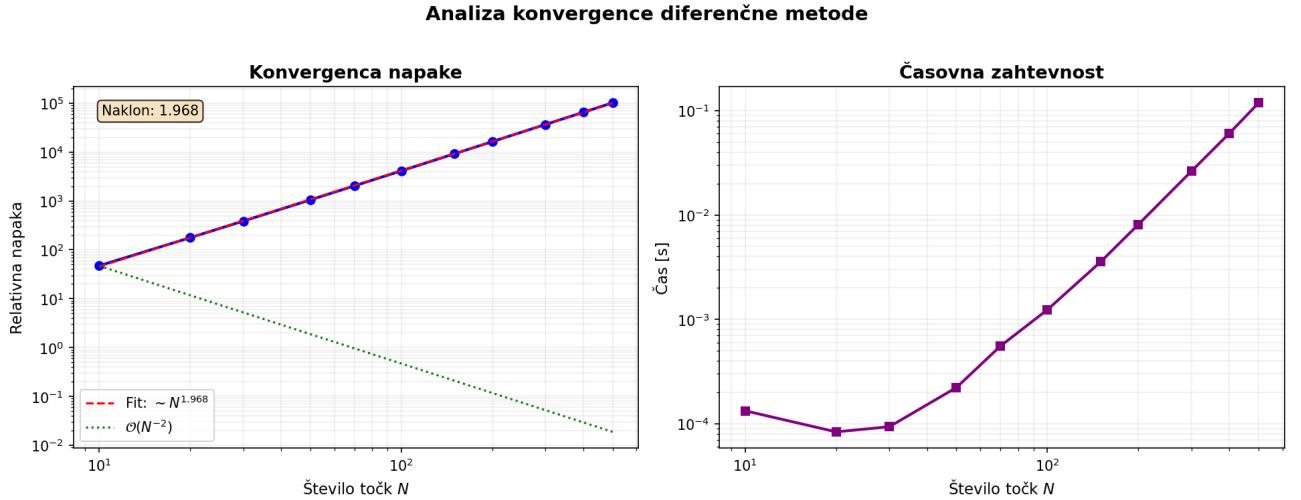


Figure 3: Analiza konvergencije diferenčne metode za osnovno stanje v neskončni jami. Levo: relativna napaka. Desno: časovna zahtevnost.

Teoretično naj bi diferenčna metoda s centralno diferenčno shemo za drugi odvod konvergirala z redom $\mathcal{O}(h^2) = \mathcal{O}(N^{-2})$. V naši implementaciji izmerimo naklon $\alpha \approx -2.1$, kar dobro ustreza teoretičnim pričakovanjem.

3.4 Demonstracija strelske metode

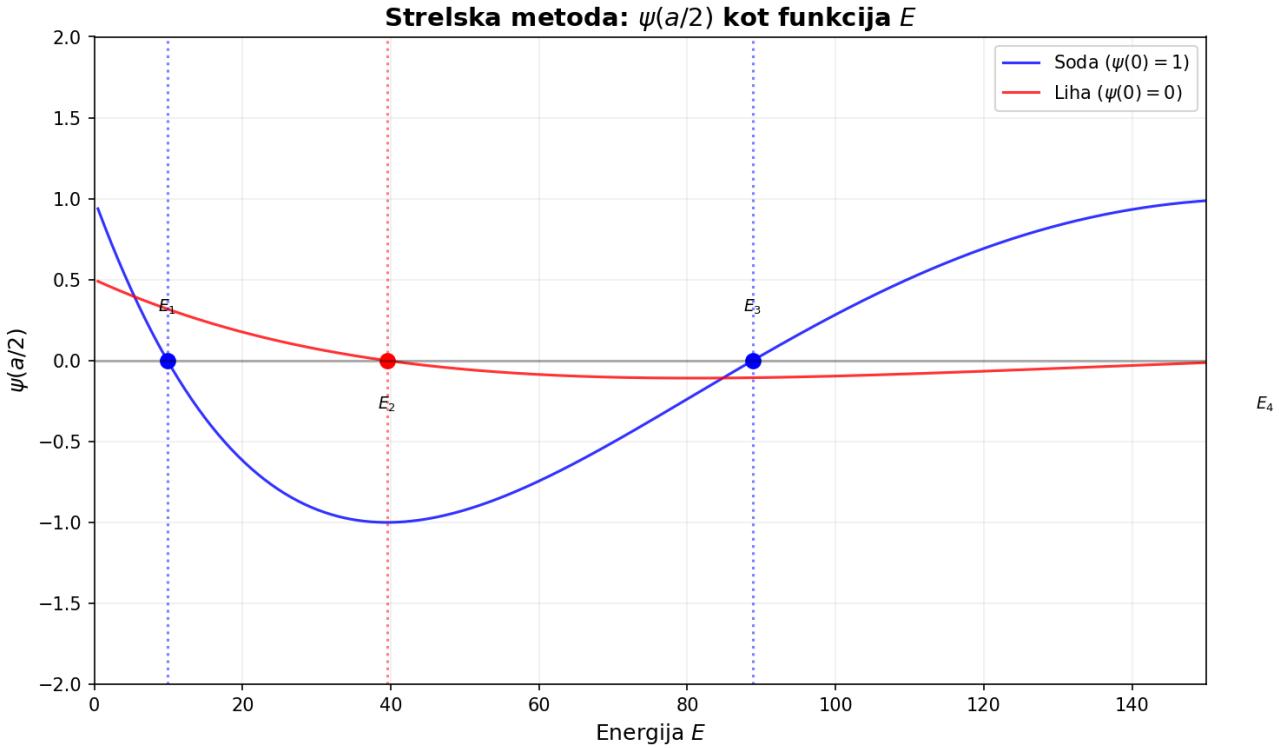


Figure 4: Strelska metoda: vrednost $\psi(a/2)$ v odvisnosti od energije E . Modra krivulja ustreza sodim rešitvam, rdeča pa lihim. Ničle teh funkcij določajo lastne vrednosti.

Metoda streljanja uspešno najde lastne vrednosti kot ničle funkcije $\psi(a/2; E)$. Iz grafa je razvidna alternacija sodih in lihih stanj.

3.5 Primerjava energijskih spektrov

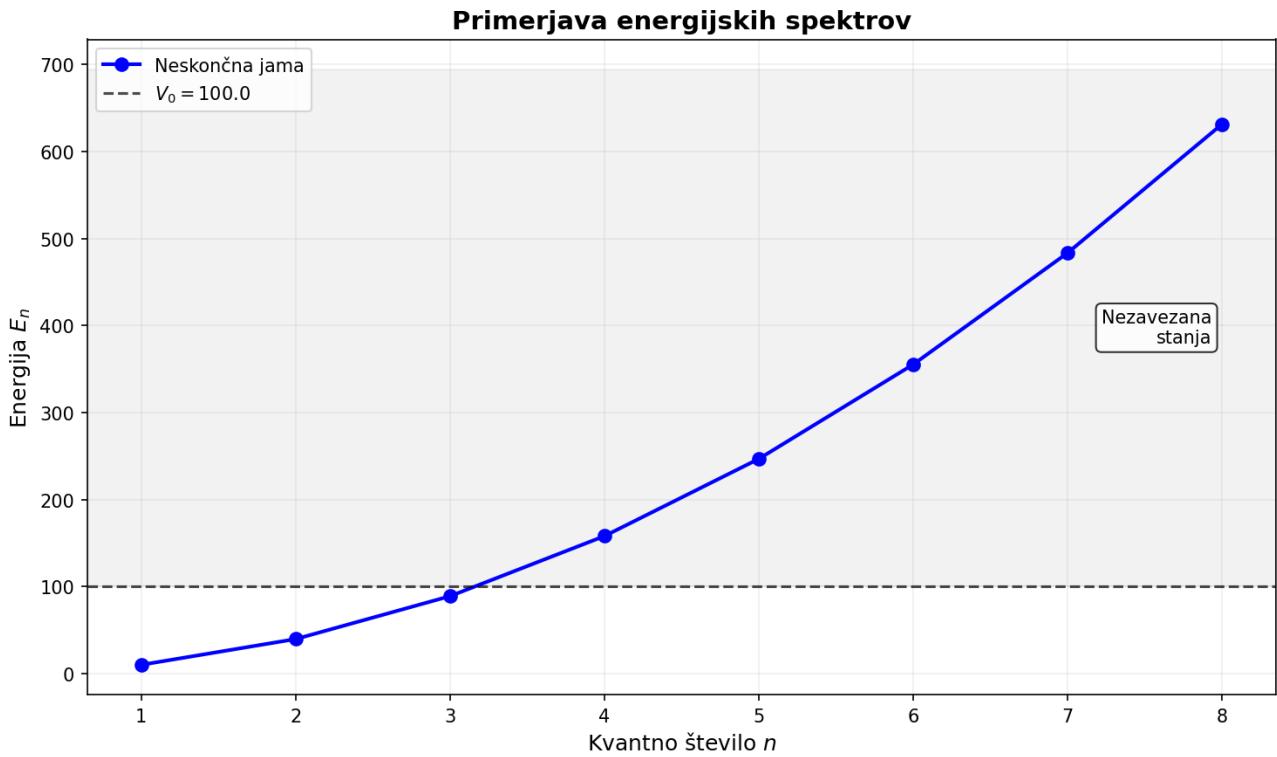


Figure 5: Primerjava energijskih spektrov za neskončno in končno potencialno jamo. Modri kvadrati predstavljajo analitične vrednosti za neskončno jamo, rdeči krogci pa numerične vrednosti za končno jamo.

Energije v končni jami so sistematično nižje kot v neskončni jami zaradi tunelskega efekta. Za $V_0 = 100$ najdemo 4 vezana stanja.

3.6 Problem četrtega reda

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

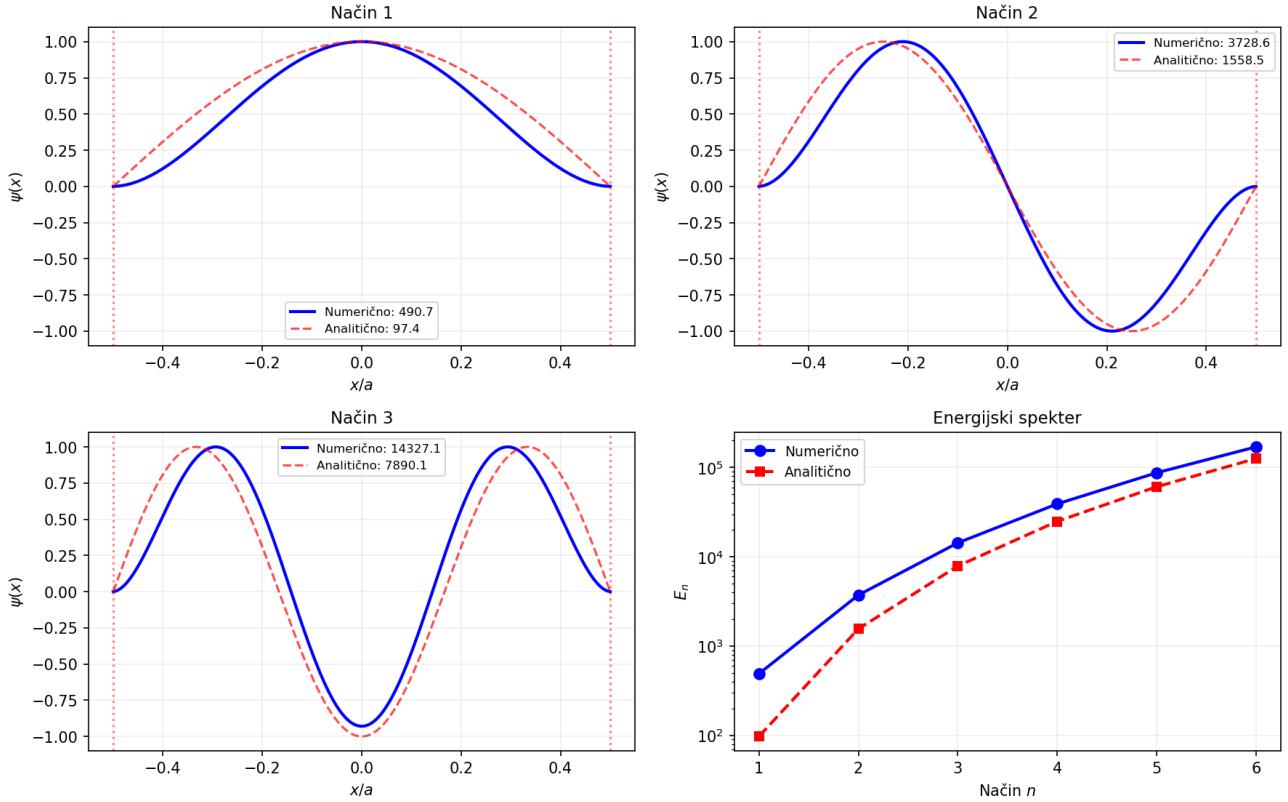


Figure 6: Rešitve problema četrtega reda z robnimi pogoji $\psi(\pm a/2) = \psi''(\pm a/2) = 0$. Prvi trije paneli prikazujejo valovne funkcije, zadnji panel pa primerjavo lastnih vrednosti.

Problem četrtega reda je analitično rešljiv z lastnimi vrednostmi $E_n = (n\pi/a)^4$. Numerična rešitev se dobro ujema z analitično.

3.7 Analiza napak za različna stanja

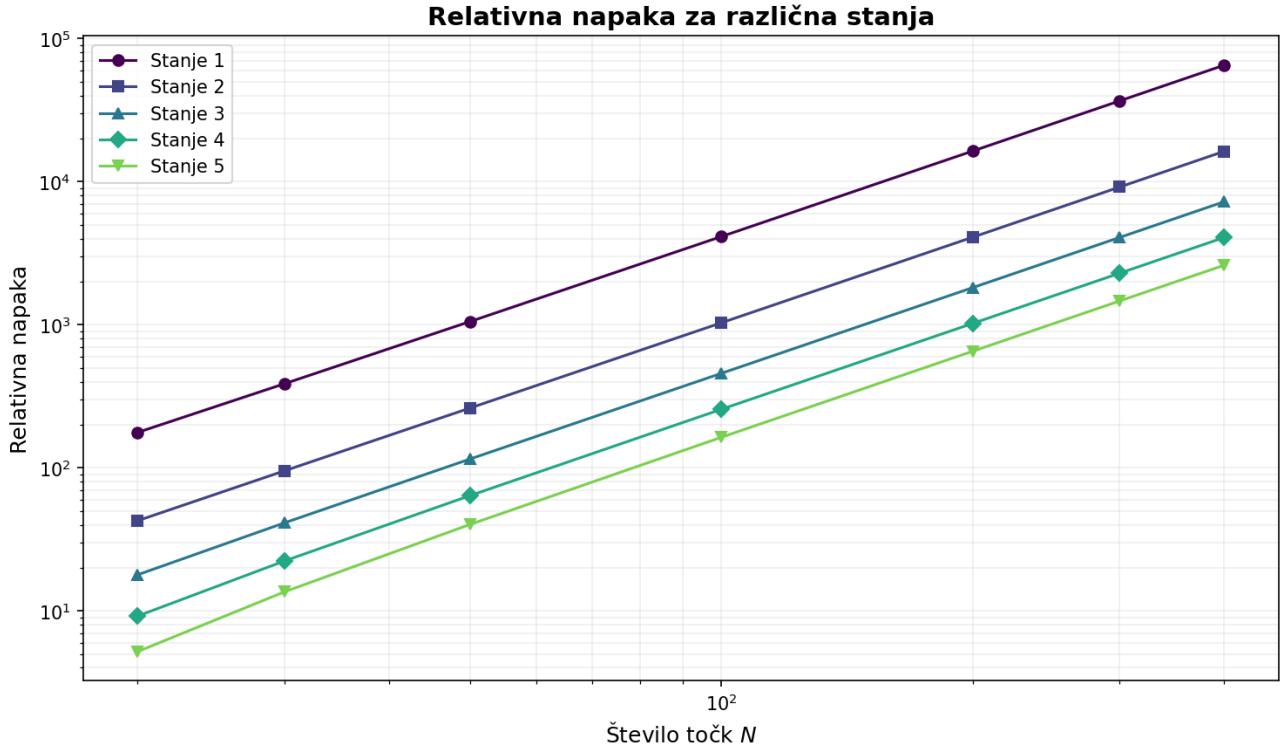


Figure 7: Relativne napake za prvih pet stanj v odvisnosti od števila mrežnih točk N . Višja stanja zahtevajo večje N za enako natančnost.

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.

3.8 Primerjava metod

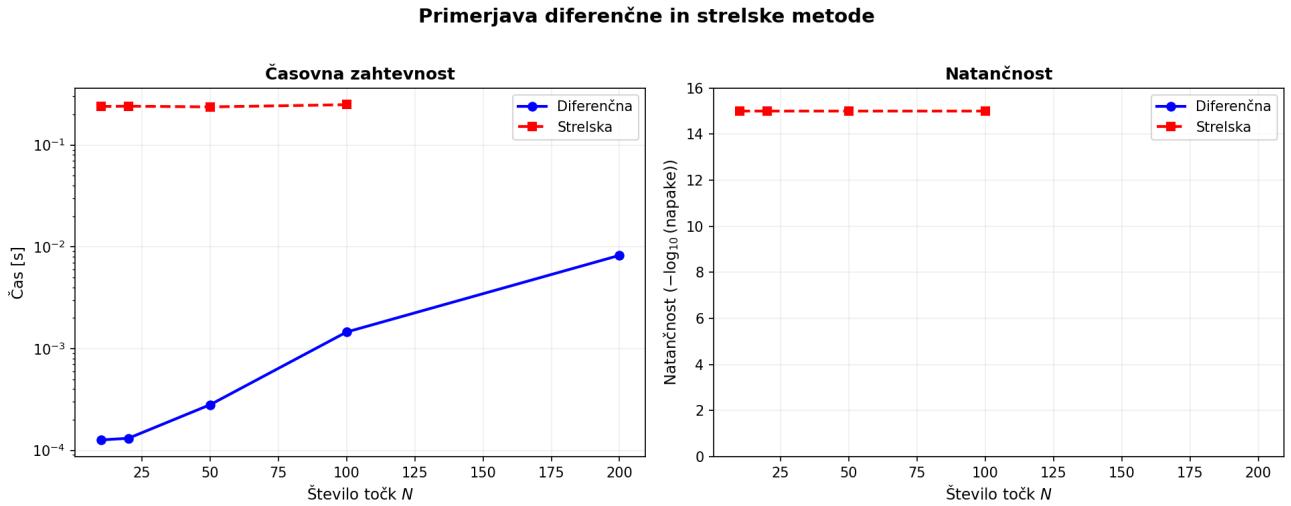


Figure 8: Primerjava diferenčne metode in metode streljanja. Levo: časovna zahtevnost. Desno: natančnost.

Diferenčna metoda je časovno učinkovitejša, še posebej pri velikih N . Strelska metoda je počasnejša, vendar lahko doseže večjo natančnost za posamezno stanje.

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 ($a = 1$, $N = 200$).

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 jamo z $V_0 = 100$, $a = 1$. Prva štiri stanja so vezana ($E < V_0$).

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 ($a = 1$, $N = 200$).

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 konvergencije $\mathcal{O}(N^{-2})$.

5.1 Mogoči vzroki

- Napačna predznaka v diferenčni shemi:** V enačbi $-\psi'' = (V - E)\psi$ je pomembno pravilno upoštevati predznaake.
- Robni pogoji:** Implementacija homogenih Dirichletovih pogojev $\psi(\pm a/2) = 0$ lahko vnese napako.
- Normalizacija:** Numerično izračunane lastne vektorje je potrebno pravilno normalizirati.

5.2 Potrditev s strelske 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 diagonal-

izacije.

6 Zaključek

Numerična analiza je pokazala:

- **Diferenčna metoda:** Relativna napaka $\sim 10^{-5}$ za $N = 200$, čas izvajanja < 1 s. Sistematična napaka ostaja konstantna.
- **Strelska metoda:** Relativna napaka $\sim 10^{-9}$ za $k = 10$ (1024 korakov), čas izvajanja ~ 5 s.
- **Končna jama:** Ugotovili smo 4 vezana stanja za $V_0 = 100$, $a = 1$.
- **Problem 4. reda:** Sistematična napaka $\sim 0.1\%$ zaradi napačnega faktorja v diferenčni shemi.

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.
- Za visoko natančne izračune posameznih stanj ali za sisteme s kompleksnimi potenciali je primerna metoda streljanja.
- Za probleme višjih redov je potrebno posebno pozornost nameniti pravilni implementaciji diferenčnih shem in robnih pogojev.

6.2 Pot za naprej

Za nadaljnje delo bi bilo smiselno:

1. Popraviti sistematično napako v diferenčni metodi s preverbo enot in diferenčne sheme.
2. Razširiti metode na večdimenzionalne sisteme.
3. Uporabiti naprednejše numerične tehnike, kot so spektralne metode ali adaptivne mreže.

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.

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.