10. naloga: Diferenčne metode za parcialne diferencialne enačbe

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 $\hbar = m = 1$,

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

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

$$\psi(x,t+\Delta t) = e^{-\mathrm{i}H\Delta t}\psi(x,t) \approx \frac{1-\frac{1}{2}\mathrm{i}H\Delta t}{1+\frac{1}{2}\mathrm{i}H\Delta t}\psi(x,t)\,, \tag{2}$$

ki je unitaren in je reda $\mathcal{O}(\Delta t^3)$. Območje $a \le x \le b$ diskretiziramo na krajevno mrežo $x_j = a + j\Delta x$ pri $0 \le j < N$, $\Delta x = (b-a)/(N-1)$, 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

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

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

$$\mathbf{\Psi}^n = (\psi_0^n, \psi_1^n, \ldots, \psi_{N-1}^n)^T$$

in sistem prepišemo v matrično obliko

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

kjer je

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

Dobili smo torej matrični sistem, ki ga moramo rešiti v vsakem časovnem koraku, da iz stanja $\mathbf{\Psi}^n$ dobimo stanje $\mathbf{\Psi}^{n+1}$. Matrika A in vektor $\mathbf{\Psi}$ imata kompleksne elemente, zato račun najlažje opraviš v kompleksni aritmetiki[1].

Naloga: Spremljaj 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

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

kjer je $\xi = \alpha x$, $\xi_\lambda = \alpha\lambda$. Postavi parametre na $\omega = 0.2$, $\lambda = 10$. 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

$$\psi(x,0) = (2\pi\sigma_0^2)^{-1/4} e^{\mathrm{i}k_0(x-\lambda)} e^{-(x-\lambda)^2/(2\sigma_0)^2}$$

v prostoru brez potenciala. Postavi $\sigma_0 = 1/20$, $k_0 = 50\pi$, $\lambda = 0.25$ in območje $[a,b] = [-0.5, 1.5]$ ter $\Delta t = 2\Delta x^2$. Časovni razvoj spremljaj, dokler težišče paketa ne pride do $x \approx 0.75$. Analitična rešitev je

$$\psi(x,t) = \frac{(2\pi\sigma_0^2)^{-1/4}}{\sqrt{1 + \mathrm{i}t/(2\sigma_0^2)}} \exp\left[\frac{-(x-\lambda)^2/(2\sigma_0)^2 + \mathrm{i}k_0(x-\lambda) - \mathrm{i}k_0^2 t/2}{1 + \mathrm{i}t/(2\sigma_0^2)} \right]$$

Dodatna naloga: Z uporabljenim približkom za drugi odvod reda $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ dobimo tridiagonalno matriko. Z diferencami višjih redov dobimio večdiagonalno (pasovno) matriko, a dosežemo tudi večjo krajevno natančnost. Diference višjih redov lahko hitro izračunaš v Mathematici s funkcijo

```
FD[m_,n_,s_] := CoefficientList[Normal[Series[x^s Log[x]^m, x, 1, n]/h^m], x];
```

kjer je `m` red diference (odvoda), `n` število intervalov širine $h = \Delta x$, ki jih diferenca upošteva, in `s` število intervalov med točko, kjer diferenco računamo, in skrajno levo točko diferenčne sheme. Zgornjo tritočkovno sheme za drugo diferenco dobimo kot `FD[2, 2, 1]`, saj se razpenja čez `n=2` intervala, sredinska točka pa je v točki z indeksom `s=1`.

Tudi korakanje v času je mogoče izboljšati z uporabo Padéjeve aproksimacije za eksponentno funkcijo, glej [1].

Literatura

[1] W. van Dijk, F. M. Toyama, Phys. Rev. E **75**, 036707 (2007).

[1] `#include <complex.h>` v `c`, `#include <complex>` v `c++`, `from cmath import *` za kompleksne funkcije v Pythonu (sama kompleksna aritmetika pa je vgrajena).