

## 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  $\hbar = m = 1$ ,

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

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  $\Psi^n$  dobimo stanje  $\Psi^{n+1}$ . Matrika  $A$  in vektor  $\Psi$  imata kompleksne elemente, zato račun najlažje opraviš v kompleksni aritmetiki<sup>1</sup>.

*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

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

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

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

*Dodatna naloga:* Z uporabljenim približkom za drugi odvod reda  $\mathcal{O}(\Delta x^2)$  dobimo tridiagonalno matriko. Z diferencami višjih redov dobimo večdiagonalno (pasovno) matriko, a dosežemo tudi večjo krajevno natančnost. Diference višjih redov lahko hitro izračunaš na primer 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 difference (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] in/ali predavanje.

## Literatura

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

---

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