8. naloga: Robni problem lastnih vrednosti

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.

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)?

Dodatna naloga: Določi nekaj najnižjih lastnih funkcij ψ in lastnih vrednosti $E = k^4$ diferencialne enačbe

$$\frac{\mathrm{d}^4\psi}{\mathrm{d}x^4} - E\psi = 0$$

(pozor, minus) na intervalu $[-a/2, a/2]$ z robnimi pogoji

$$\psi(\pm a/2) = \psi''(\pm a/2) = 0$$

z diferenčno metodo oziroma diagonalizacijo. (Strelska metoda pri robnih problemih četrtega reda ni najbolj primerna.) Namesto četrtega odvoda uporabi izraz za četrto diferenco, tako da ima i-ta diferenčna enačba obliko

$$\psi_{i-2} - 4\psi_{i-1} + 6\psi_i - 4\psi_{i+1} + \psi_{i+2} = \underbrace{h^4k^4}_{\lambda}\psi_i\,.$$

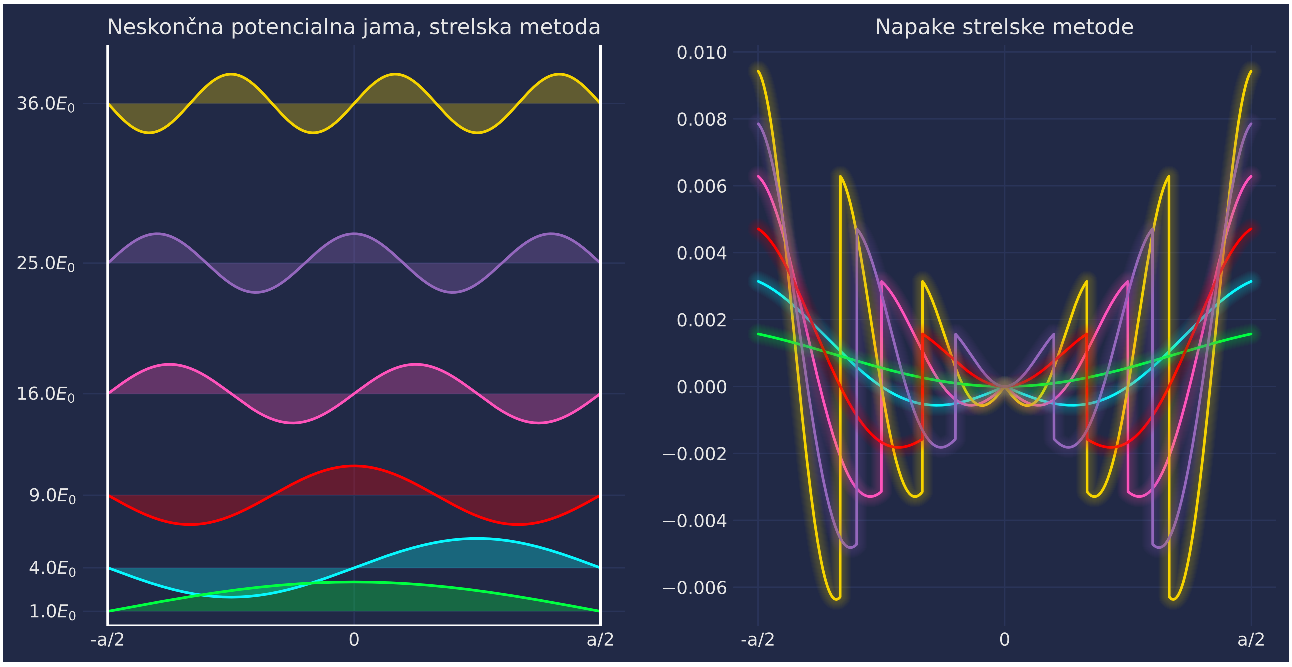
Ko diskretiziraš še robne pogoje, podobno kot pri enačbi drugega reda rešuješ petdiagonalni sistem linearnih enačb.

1 Reševanje

V in E morata biti normirana z predfaktorjem pred 2. odvodom Schrondingerjeve enacbe. Lahko kar pozabimo na vse konstante in računamo relativne vrednosti energij, lastne funkcije pa so tako ali tako normirane.

Za to vajo sem se precej potrudil za zgled grafov in za to porabil kar preveč časa...

Najprej je najlažje narisati kar stelsko metodo za neskončno jamo.



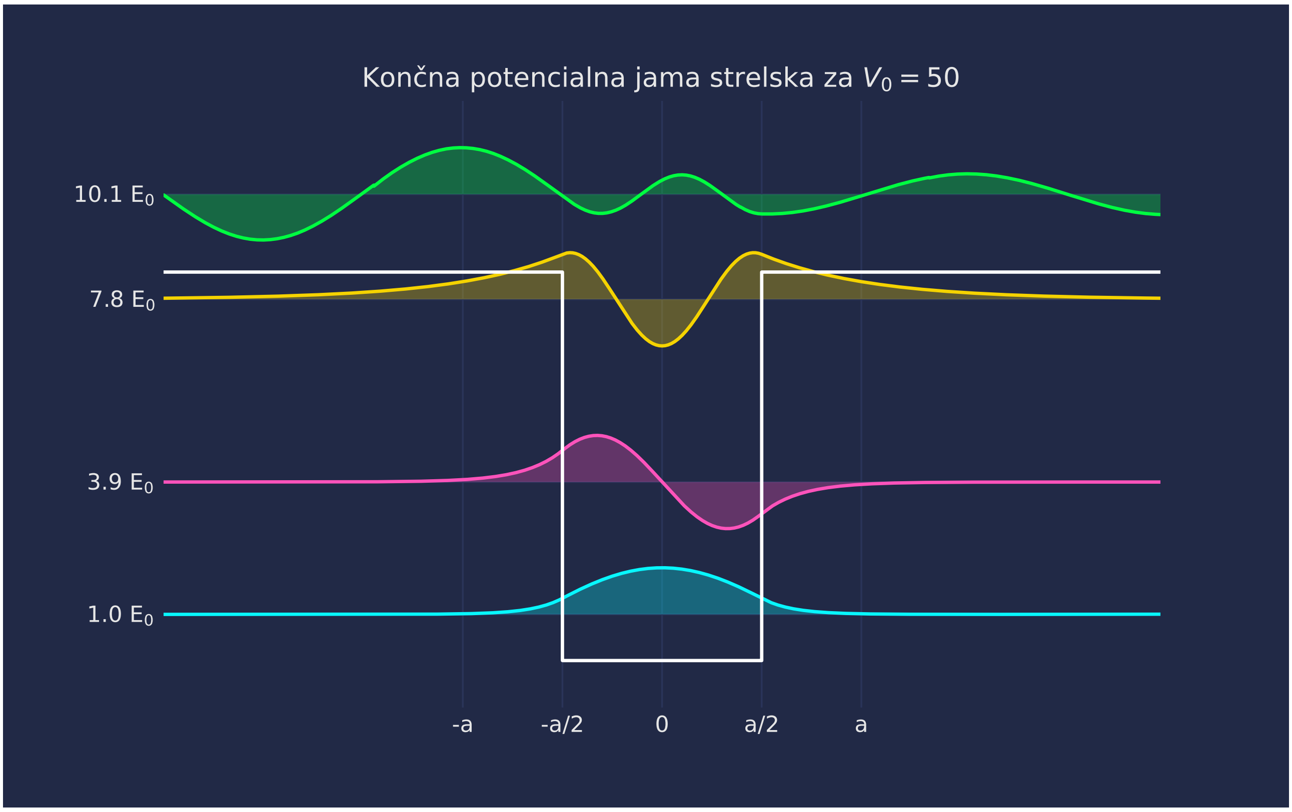
Slika 1: Lastne funkcije za neskoncno potencialne

Iz grafa opazimo, da so napake precej majhne, lahko pa bi jih poljubno zmanjšal, če bi povečal število točk merjenja (uporabljam RK4, kar pomeni, da je napaka polinom stopnje 4), vendar v tem primeru ni tako važno (samo moj računalnik bi bolj trpel). Napaka na levi strani je relativna (in enaka relativni), ker sem funkcije najprej normiral z maksimumi.

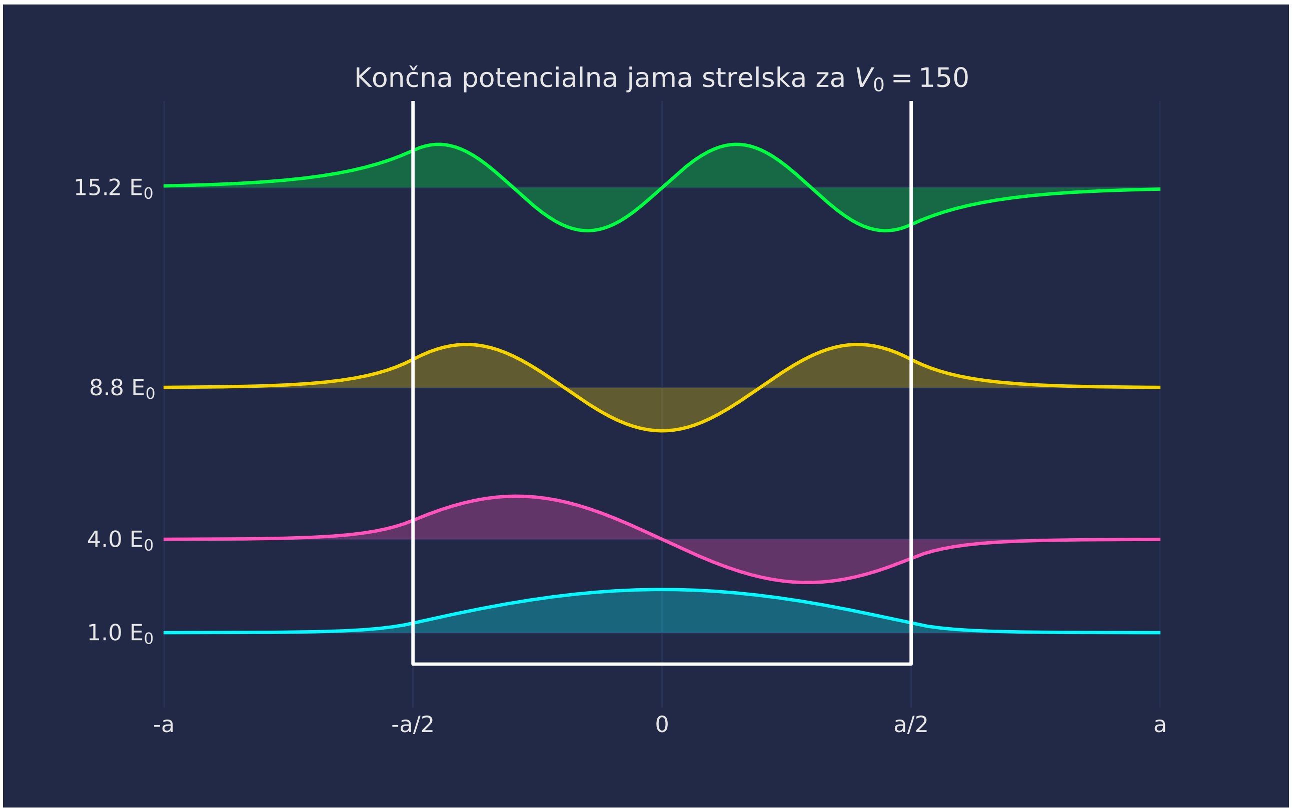
1.1 Končna jama strelska

Najprej sem šel reševat z posameznimi funkcijami in enačil, da more biti odvod pri a/2 zvezen. To najdemo z bisekcijo drugega odvoda. Metoda je bila nenatančna, zato sem se odločil za implementacijo iz neskončnosti v neskončnost.

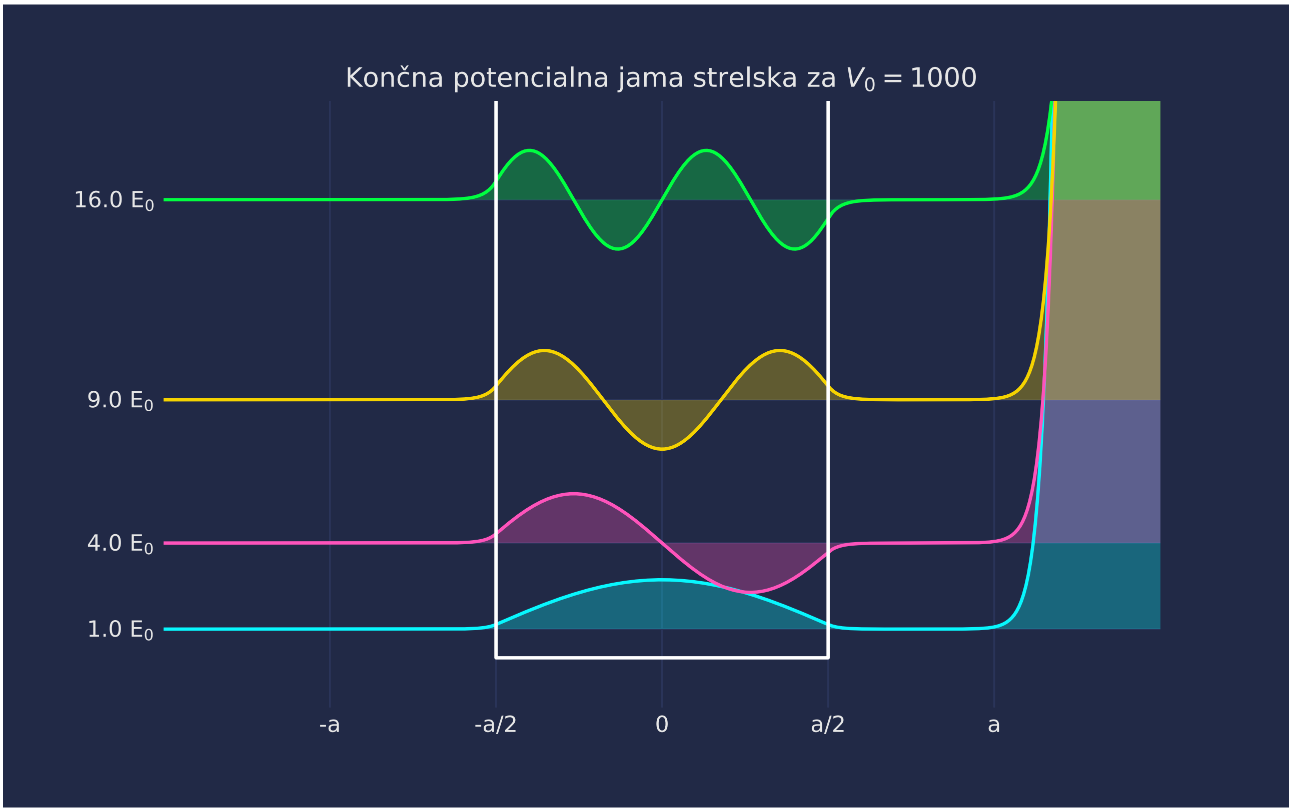
Logično je tudi, da lastne vrednosti konvergirajo čedalje bolj proti vrednosti neskončne potencialne jame, ko povečujemo V_0.



Slika 2: Lastne funkcije za koncno potencialno jamo, $V_0 = 50$



Slika 3: Lastne funkcije za koncno potencialno jamo, $V_0 = 50$



Slika 4: Lastne funkcije za koncno potencialno jamo, $V_0 = 1000$

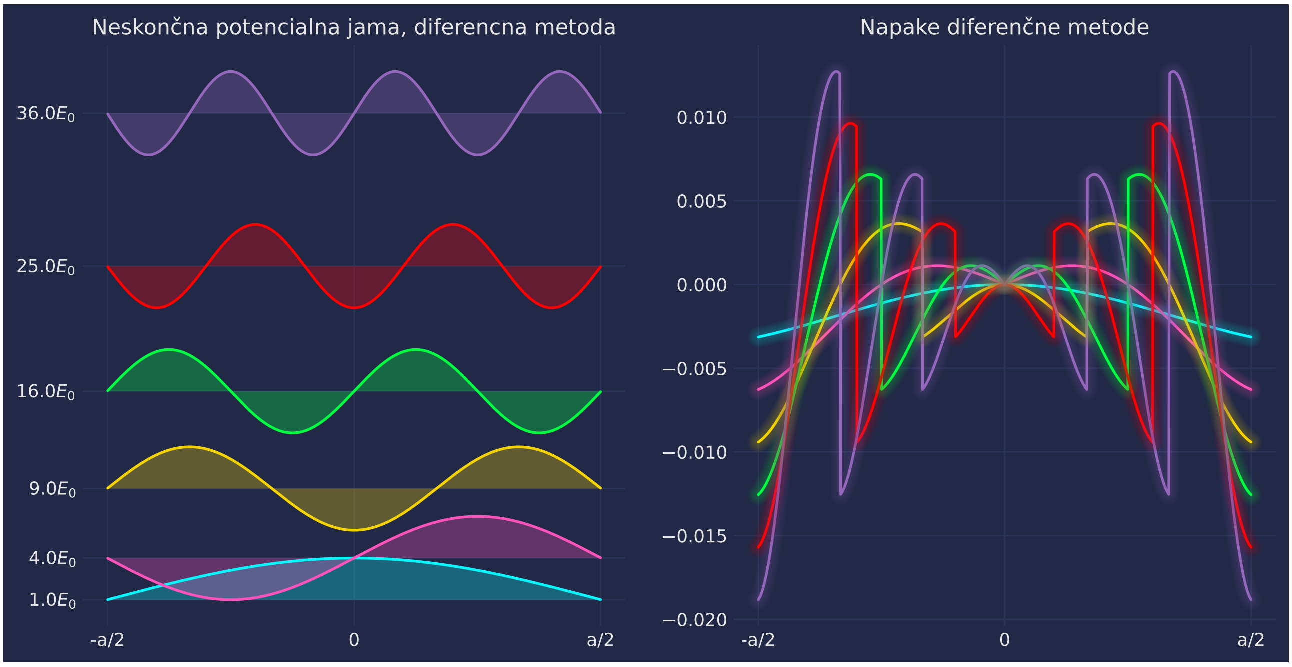
Za implementacijo zgornjega grafa je šlo kar precej energije. Implementiral sem ga z opazovanjem robnih pogojev od -5 do 5. Potem z bisekcijo dobim tako energijo, da bo pri 5 čim bližje pogoju na levi strani. Kar je zelo problematično glede implementacije je, da vrednost pri 5 zmeraj divergira. Kar vbistvu bisekcija naredi. je, da poišče najmanjšo vrednost pri kateri dobimo pozitivno in negativno vrednost $-\infty$ in ∞ (kar je čisto pravilna energija).

Opazimo lahko tudi, da je za prosta stanja ($V_0 = 50$ in $n > 4$) ni vseeno iz katere strani integriramo. Amplituda sinusa je namreč večja na levi kot na desni strani. Kar se tukaj zgodi iz smisla kvantne fizike je, da je primer vbistvu potencialna bariera, in se delci iz leve sipajo.

Pri grafu 8 je smiselno komentirati, da bi lahko z bolj natnačno bisekcijo, območje divergence premaknil v desno z večjo natančnostjo (vendar sem hotel pokazati kaj se zgodi za prejmajhno natančnost).

1.2 Diferenčna metoda

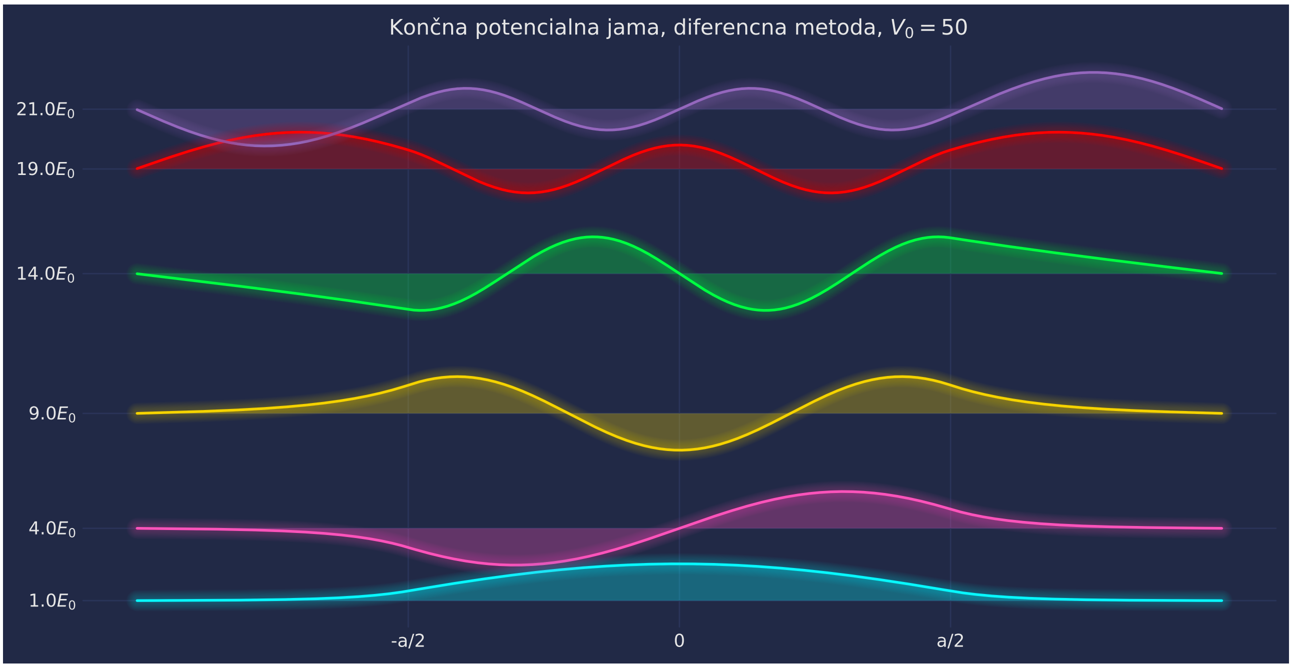
Dobimo popolnoma enake grafe, kot pri strelski metodi, s tem, da je implementacija lažja, ker samo diagonaliziramo tridiagonalno matriko.



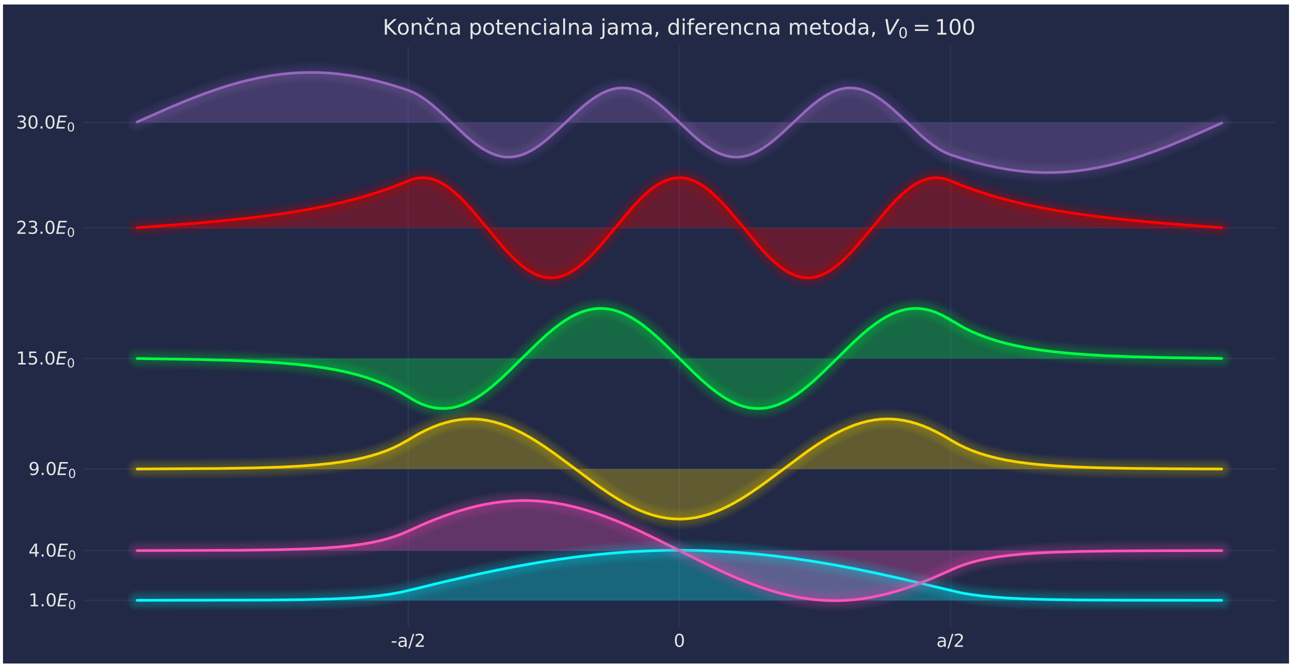
Slika 5: Lastne funkcije za neskoncno potencialne, diferenčna

Opazimo lahko, da je napaka precje majhna ter pri istem število točk (N=1000), je tudi približno enako velika. Iz tega sklepam, da sta obe metode precej podobni, verjetno je strelska.

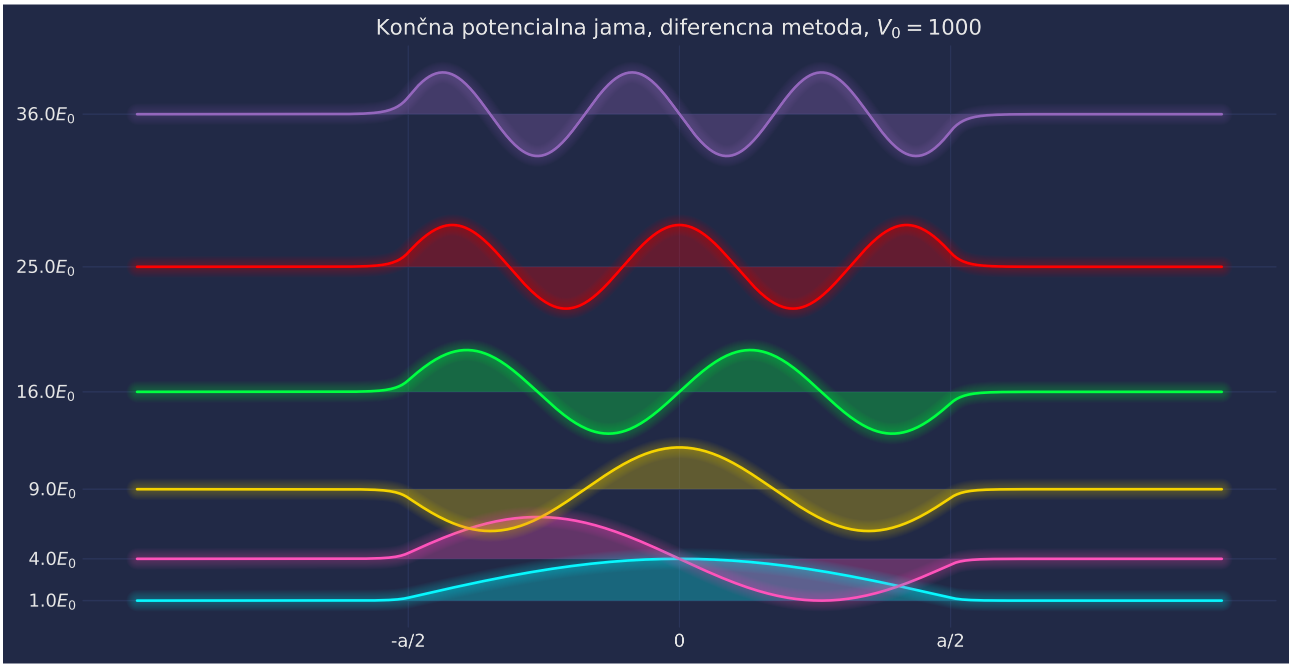
1.3 Diferenčna, končna metoda



Slika 6: Lastne funkcije za koncno potencialno jamo, $V_0 = 50$



Slika 7: Lastne funkcije za koncno potencialno jamo, $V_0 = 100$



Slika 8: Lastne funkcije za koncno potencialno jamo, $V_0 = 1000$

Precej lažje je rešiti homogen sistem, ko prestimo energijo navzgor. Dobimo enake grafe, kot smo jih dobili pri strelski metodi.

2 Zaključek

Vsi grafi so zelo podobni za obe metodi. To pomeni, da sem implementiral pravilno (sodeč po grafih napak).