Matematično-fizikalni praktikum 2024/25

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 in končno 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 $c_1\psi(a/2) + c_2\psi'(a/2) = 0$. Alternativno, lahko pri končni jami problem obrnemo in začnemo daleč stran, kjer je funkcija (in odvod le-te) skoraj nič, ter poskušamo zadeti pogoj (soda,liha funkcija) v izhodišču. Preveri, kaj je bolje (bolj stabilno, natančno)! 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

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

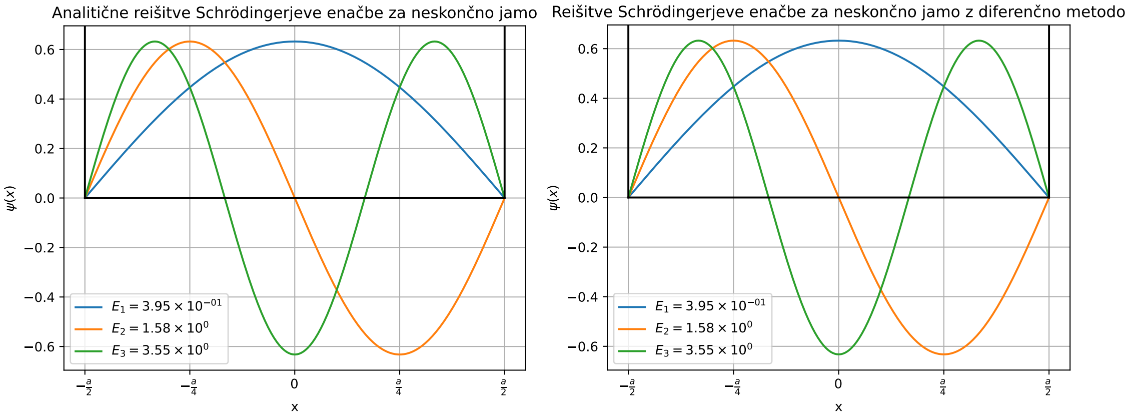
z diferenčno metodo oziroma diagonalizacijo. (Strelska metoda pri robnih problemih četrtega reda ni najbolj primerna.) Namesto četrtega odvoda uporabi izraz za četrto diferenco, tako da ima i-ta diferenčna enačba obliko

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

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

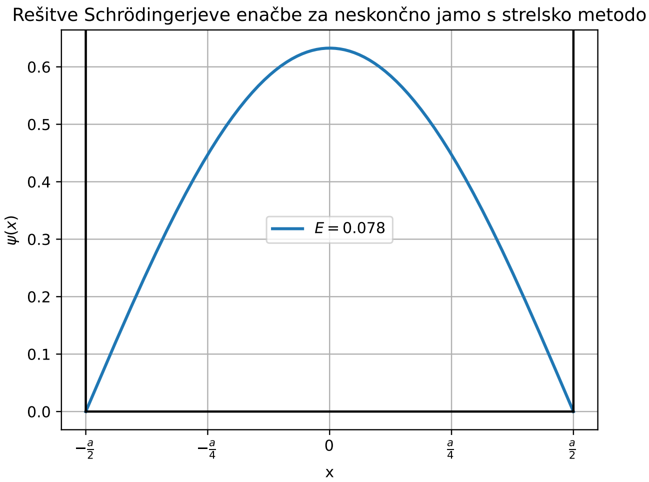
1 Rešitev

Najprej si poglejmo če sploh znamo kaj izrisat numerično.



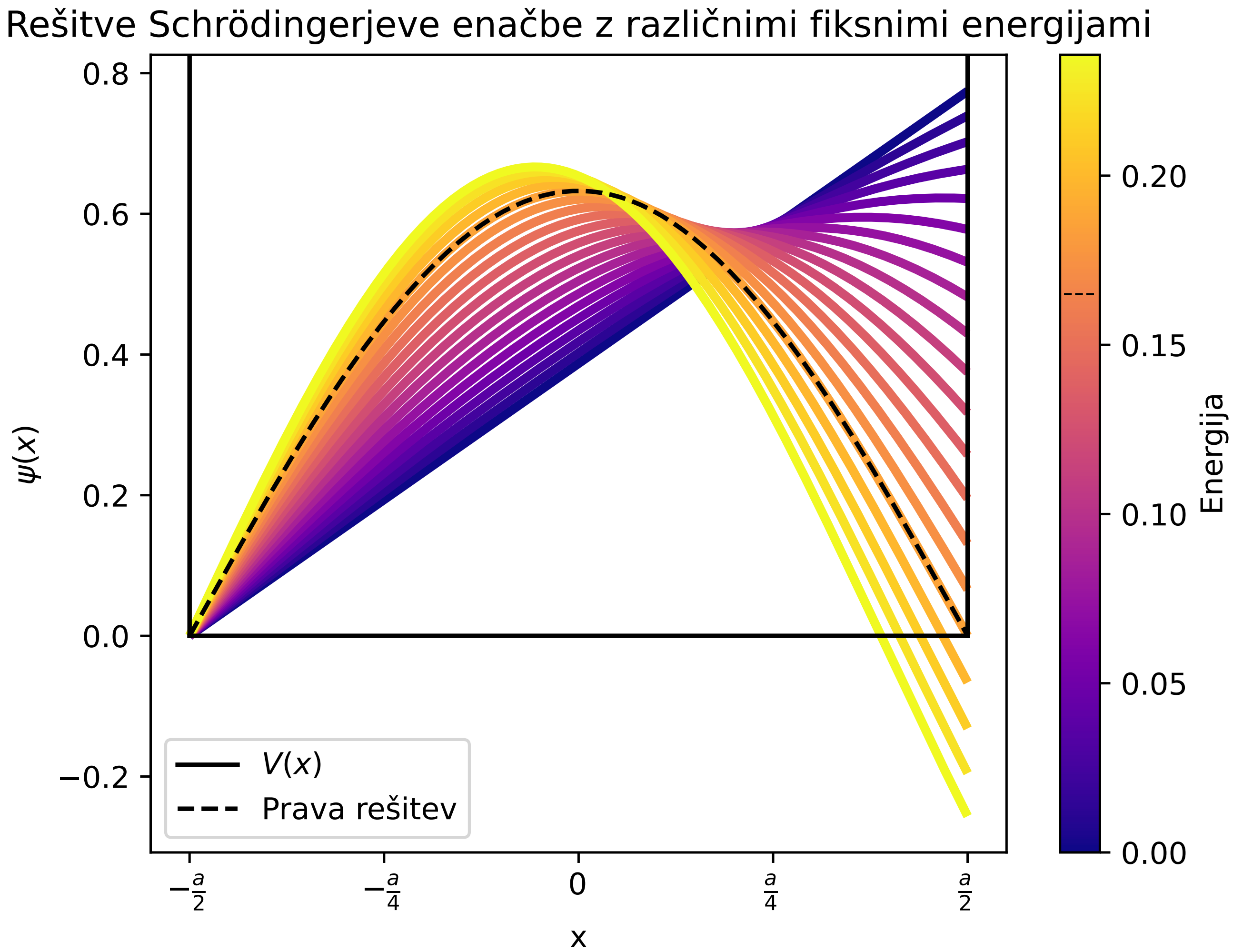
Slika 1: Primerjava analitične in numerične rešitve za neskončno globoko kvadratno jamo.

Vidimo, da neki znamo. Poglejmo si še strelsko metodo. Lastna vrdnost se ujema.



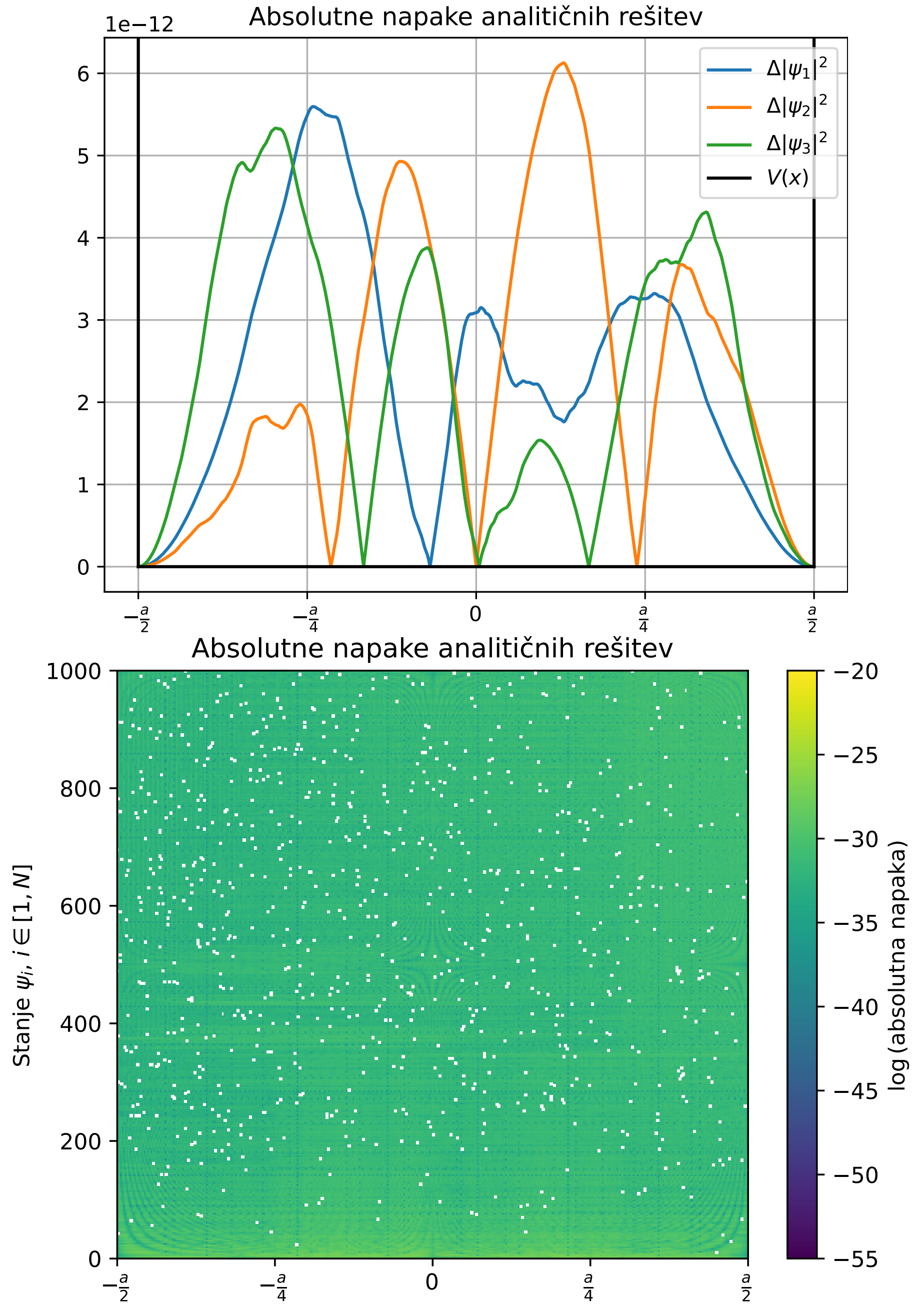
Slika 2: Strelska metoda za neskončno globoko jamo, kjer vidimo tudi lastno vrednost.

Poglejmo kako se obnaša strelska metoda za različne fiksne energije. Še kako se absolutna napaka

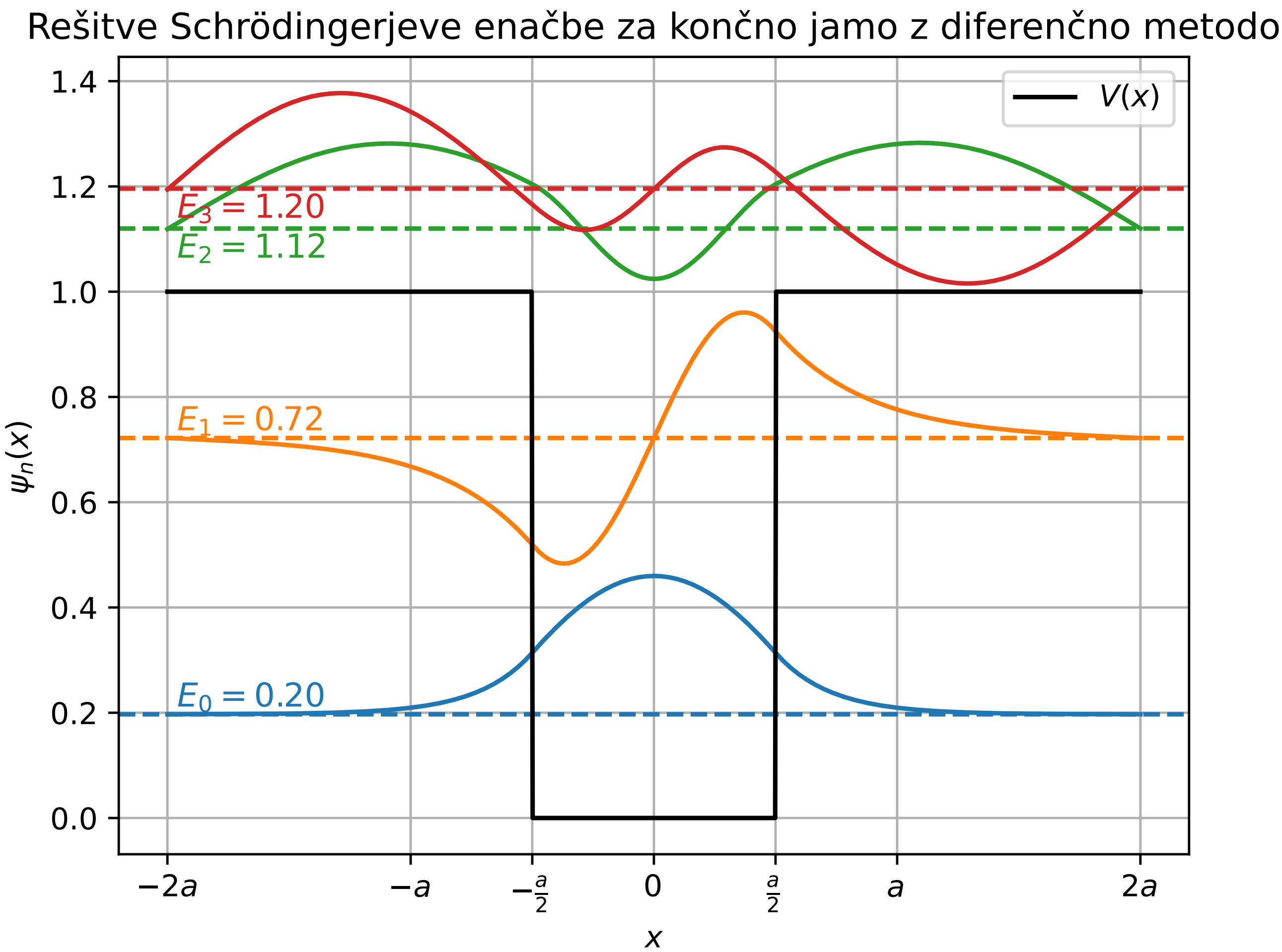


Slika 3: Strelska metoda za neskončno globoko jamo, z različnimi fiksnimi energijami.

odvisna od pozicije in stanja.



Slika 4: Absolutna napaka diferenčne metode za neskončno globoko jamo.



Slika 5: Lastne vrednosti in lastni vektorji za končno globoko jamo.

Nazadnje še lastne vrednosti in lastni vektorji za končno jamo.