

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = E\psi$$

za neskončno potencialno jamo ($V(-a/2 < x < a/2) = 0$ in $V(|x| \geq a/2) \rightarrow \infty$) 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

$$\frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{h^2} + E\psi_i = 0$$

ozziroma

$$\psi_{i-1} - (2 - \lambda)\psi_i + \psi_{i+1} = 0 ,$$

kjer je $\lambda = Eh^2 = k^2 h^2$. 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 ozziroma $N - 1$ linearnih enačb

$$A\underline{\psi} = \lambda\underline{\psi}$$

za lastne vektorje $\underline{\psi}$ in lastne vrednosti λ , ki ga rešujemo z diagonalizacijo.

Pri *strelskej 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 robeni pogoj, $\psi(a/2) = 0$. Vrednost E spremenjamo tako dolgo, dokler robeni 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 poskusиш še iterativno in s kakšno drugo metodo. Problem končne Jame je s strelske 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

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

(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 differenco, tako da ima i -ta diferenčna enačba obliko

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

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