UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

Matematično-fizikalni praktikum

# 8. naloga: Robni problem lastnih vrednosti

Žiga Šinigoj, 28191058

Ljubljana, december 2021

# 1 Uvod

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 $\lambda$, 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.

# 2 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)?

# 3 Rezultati

## 3.1 Neskončna potencialna jama

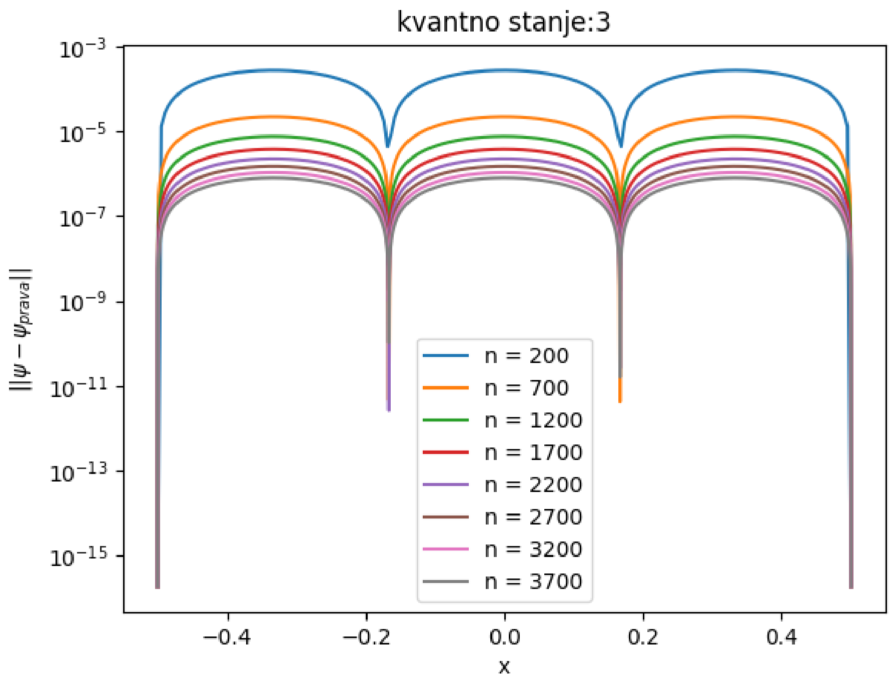
Ker je problem simetrijski sem reševal samo za pozitivno polravnino in potem prezrcalil sodo ali liho rešitev na negativno polravnino. Za končno jamo so rešitve sinusi oz. kosinusi. Za energijo sem vzel kar $E_n = n^2$.

### 3.1.1 Implementacija strelske metode

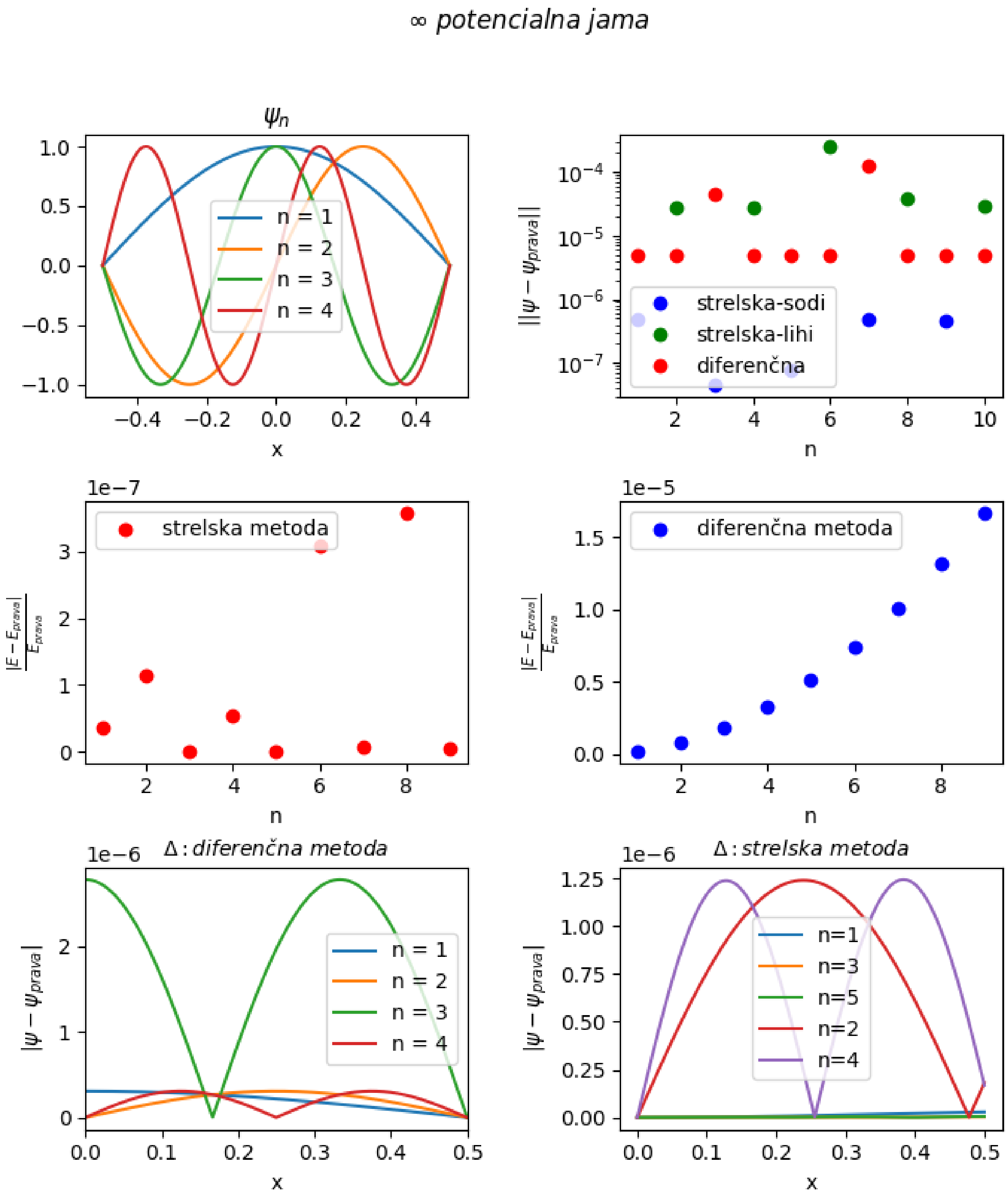
Kot integrator sem uporabil Runge-Kutta 4 metodo z začetnimi pogoji [1,0] in [0, 1] za sode in lihe rešitve potencialne jame. Za dano energijo sem izračunal rešitev do roba jame, nato sem pogledal ali zadošča robnemu pogoju $\psi(a/2) = 0$. Uporabil sem bisekcijo, ki je za dani interval energij pregledala zadnje točke rešitev in vrnila tisto vrednost energije, za katero je zadnja točka poljubno blizu ničle-v mojem primeru $\epsilon = 10^{-7}$. Če bil interval med energijama manjši od natančnosti pa ni nujno, da je imela zadnja točka rešitve takšno natančnost. Ko sem dobil energije sem z RK4 poiskal rešitve oz. lastne funkcije jame (slika 2.)

### 3.1.2 Implementacija diferenčne metode

Pri metodi končnih diferenc sem naredil kvadratno matriko velikosti, ki je enaka številu točk na mreži intervala. Za mrežo intervala sem vzel 2000 točk na intervalu x $\in$ [-0.5, 0.5]. Pri diferenčni metodi dobimo naenkrat vse lastne funkcije in lastne vrednosti. Matrika je v našem primeru tridiagonalna z -2 na diagonali in 1 na obeh obdiagonalih. Vektorjem, sem dodal ničlo na koncu in začetku, tako sem upošteval robne pogoje. Lastne vrednosti in funkcije sem dobil z metodo *linalg.eigh*() iz paketa NumPy (slika 2).
Pogledal sem tudi odstopanje diferenčne metode v odvisnosti od veliksoti matrike oz. številu točk na mreži pri določenem kvantnem stanju (slika 1). Natančnost se z drobljenjem mreže pričakovano izboljšuje. Opazim lahko, da na natančnost vpliva tudi približek drugega odvoda, ki ga uporabimo za rešitev sistema. Iz grafa je razvidno, da se napaka povečuje, ko se oddaljujemo od ničel lastne funkcije in narašča hitreje, ko se spreminja odvod funkcije. Če povečamo število točk na intervalu za 16 krat ($n : 200 \to 3200$), se maksimalna napaka zmanjša za nekaj manj kot tisoč krat. Sprememba napake med maksimalno in napako večine točk je nekje do 10-kratnika, pri $n = 3200$, razen za točke blizu ničle. Zrnatost intervala več prispeva k napaki, kljub temu pa je prispevek zapisa drugega odvoda nezanemarljiv.




Slika 1: Odstopanja diferenčne metode od števila točk na intervalu.




Slika 2: Od leve proti desni: prve 4 lastne funckije, odstopanje rešitev po drugi normi, odstopanje energij pri strelski in diferenčni metodi, odstopanje funkcij od lastnih za diferenčno in strelsko metodo.

Iz slike 2 je razvidno, da je strelska metoda precej natančnejša pri določitvi lastnih energij sistema. Pri diferenčni metodi se relativna napaka povečuje z večanjem kvantnega števila oz. stanja. Zanimivo je tudi videti, da imajo antisimetrična stanja nekoliko večjo napako, vsaj pri strelski metodi, tako po normi kot po absolutni vrednosti razlike. Mogoče je to posledica začetnega pogoja.

## 3.2 Končna potencialna jama

### 3.2.1 Rešitev transcendentne enačbe

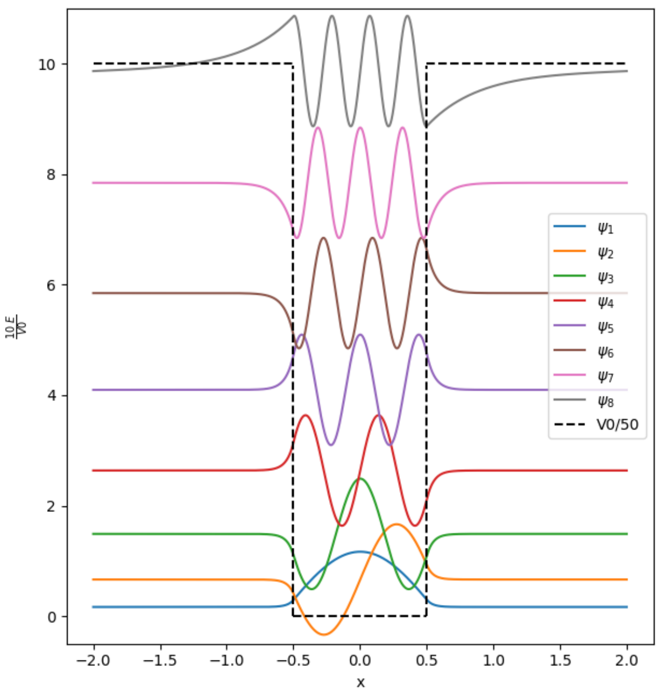
Za 'analitično' rešitev sem vzel energije, ki mi jih data transcendentni enačbi. Enačbi sem reševal z metodo *optimize.brentq* iz knjižnice SciPy, ki uporablja sekantno metodo in bisekcijo za iskanje ničel. Izkazalo se je, da lastne energije, ki mi jih da ta način niso prav zelo natančne. Na sliki 4 se vidi, da se rešitev za osnovno stanje v logaritemski skali približa ničli, a hitro ponori.

### 3.2.2 Implementacija strelske metode

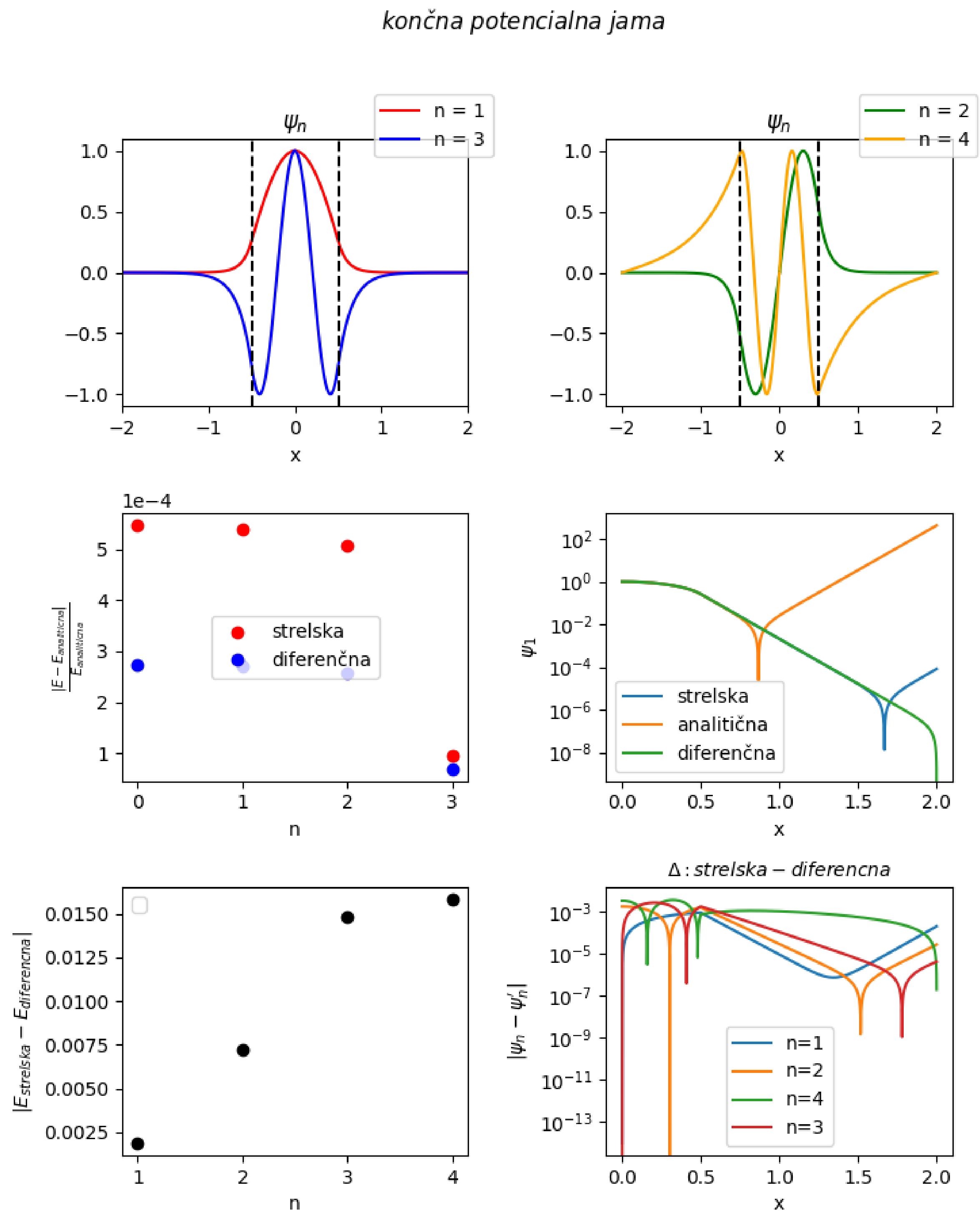
Pri implementaciji sem najprej poskušal dobiti rešitev za območje z potencialno jamo in potem na robu podal vrednosti rešitve in odvoda za RK4, ki je potem reševal drugo diferencialno enačbo z bisekcijo vrednosti zadnje točke, ki mora biti poljubno blizu ničli ($\epsilon = 1e^{-8}$). Ta način ni bil najboljši, saj se pri tem načinu spreminja samo druga rešitev in ta ni neodvisna od prve rešitve.
V delujoči implementaciji sem v inegrator RK4 vnesel pogoj, da integrator rešuje eno diferencialno enačbo za del v jami in drugo diferencialno enačbi za območje izven jame. Rešitev sem iskal samo na desni polravnini zaradi simetrije problema. Zadnjo točko rešitve sem z bisekcijo, kjer enako kot v pri neskončni jami, spreminjal interval energije in poiskal tako, da je zanja točka rešitve poljubno blizu ničli.

### 3.2.3 Implementacija diferenčne metode

Pri diferenčni metodi sem skonstruiral kinetični del matrike , ki je za 2 dimenziji manjša od intervala. Ta je enaka kot pri neskončni potencialni jami. Potencialna matrika, enake dimenzije, vsebuje na diagonali vrednosti potenicala na mestih, kjer so koordinate izven jame, ničle pa na mestih, ki so v jami. Matriki sem nato seštel in z enako metodo poiskal lastne vrednosti in vektorje sistema. Na koncu sem dodal vektorjem ničlo na koncu in začetku, da sem upošteval robne pogoje. Diferenčna metoda nam da vse lastne vrednosti in vektorje naenkrat.




Slika 3: Normalizirane rešitve končne potencialne jame pri danih energijah v potencialu $V0 = 500$ in št. točk na mreži $N = 6000$ z diferenčno metodo.




Slika 4: Od leve proti desni: Rešitev s strelsko metodo za sode in lihe lastne funkcije, relativna razlika energij, rešitev prvega stanja v log. skali, razlika lastnih energij med strelsko in diferenčno metodo, razlika po absolutni vrednosti med rešitvijo strelske in diferenčne metode. $V0 = 100$.

Na sliki 4 ima liha rešitev $n = 4$ velike repe, zato ker je lastna energija blizu potencialni energiji in stanje ni močno vezano. Kot sem omenil, so 'analitične' rešitve manj natančne, kar je razvidno pri osnovni rešitvi. Diferenčna metoda se približuje ničli do konca danega intervala. Strelska metoda doseže maksimalno natančnost pred koncem intervala in potem začne počasi divergirati. Kljub temu, da ni bil izpolnjen pogoj o predpisani natančnosti funkcije okrog ničle, je bil očitno interval med energijama tako majhen, da je to prva lastna energija. V neskončni potencialni jami je videti, da lastne energije pri diferenčni metodi odstopajo z večanjem kvantnega števila. Kot kaže, velja enako za končno potencialno jamo.

# 4 Zaključek

Pri reševanju robnih problemov je potrebno paziti na pravilno implemetacijo, saj lahko manjše napake privedejo do rezultatov, ki ne nujno izgledajo tako napačni. Prednost strelske metode je v boljši določitvi lastne energije in posledično lastne funkcije. Prednost diferenčne metode je v tem, da z rešitvijo sistema naenkrat dobimo vse lastne vrednosti in vektorje, vendar na njeno natančnost vpliva približek končnih diferenc.