

10. naloga: Diferenčne metode za parcialne diferencialne enačbe

Enorazsežna nestacionarna Schrödingerjeva 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

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-iH\Delta t} \psi(x, t) \approx \frac{1 - \frac{i}{2}H\Delta t}{1 + \frac{i}{2}H\Delta t} \psi(x, t), \quad (2)$$

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 Ψ^n dobimo stanje Ψ^{n+1} . Matrika A in vektor Ψ imata kompleksne elemente, zato račun najlažje opraviš v kompleksni aritmetiki¹. Izkaže se, da so za zadovoljivo natančnost višji redi nujni (glej dodatni del naloge).

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 Δt 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 tritokovno 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 predavanja.

Literatura

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

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