Počítačová fyzika VII

Metóda streľby

Peter Papp, Ján Ďurian

(Peter Markoš)

Katedra experimentálnej fyziky F2-81

Obsah

Metóda streľby: formulácia úlohy

Hľadajme vlastné frekvencie struny dĺžky L pevne ukotvenej na oboch koncoch.

$$\frac{\partial^2 y(x)}{\partial x^2} = -\alpha\omega^2 y(x)$$

s okrajovými podmienkami

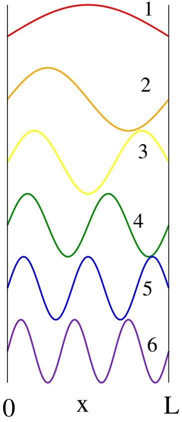
$$y(x=0) = y(x=L) = 0$$

Analytické riešenie ($\alpha = 1$) poznáme:
Vlastné frekvencie:

$$\omega_n = \frac{\pi}{L} n, \qquad n = 1, 2, \ldots$$

K nim zodpovedajúce vlastné funkcie:

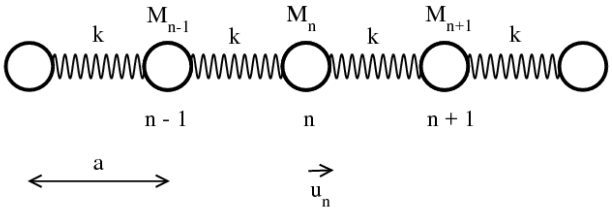
$$y_n(x) = A \sin\left(\pi n \frac{x}{L}\right)$$



Táto úloha je presne riešiteľná, ale sú aj ťažšie úlohy, na ktoré budeme potrebovať vhodný numerický algoritmus.

Metóda streľby: odvodenie základnej rovnice

Strunu si predstavíme ako jednorozmernú retiazku atómov navzájom pospájaných pružinkami:



Pohybové rovnice pre výchylky jednotlivých atómov:

$$M_n \frac{\partial^2 u_n}{\partial t^2} = -\sum_m K(u_n - u_m) = K\left[u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n\right]$$

Predpokladajme $u_n = u_n e^{-i\omega t}$ a prejdime k spojitej úlohe ($a \to 0$, $x = na$)

$$u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n = a^2 \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}$$

Metóda streľby: odvodenie základnej rovnice

Dostaneme

$$-M(x)\omega^2 u(x) = Ka^2 \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2}$$

čo je naša rovnica

$$\frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} = -\alpha(x)\omega^2 u(x)$$

s parametrom

$$\alpha(x) = \frac{M(x)}{Ka^2}$$

V homogénnom prípade rovnakých "atómov" je $\alpha(x) = \alpha$.
$M(x)/a$ má fyzikálny význam hustoty struny.

Metóda streľby – fyzikálne úlohy

- Nehomogénna struna: Úloha s predpísanou x-závislosťou hmotnosti $m(x)$:

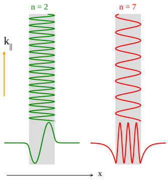
$$\frac{\partial^2 y(x)}{\partial x^2} = -\alpha(x)\omega^2 y(x)$$

- Úloha s homogénnou strunou, ale s okrajovými podmienkami

$$y(x = 0) = a, \qquad y(x = L) = b$$

  s ľubovoľnými konstantami a, b.

- Hľadanie viazaného stavu v dielektrickej vrstve (index guiding)



- V kvantovej mechanike: výpočet energie kvantovej častice viazanej v potenciálovej jame.

Metóda streľby – Algoritmus

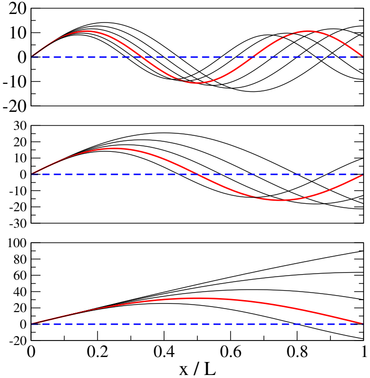
Úlohu môžeme riešiť alebo metódou diferencií (prednáška 2), alebo metódou Runge Kutta. Máme však problém:
nemáme dve štartovacie podmienky – pre funkciu a jej deriváciu,
ale
máme dve okrajové podmienky – pre hodnotu funkcie na začiatku a na konci.
Riešenie preto musíme hľadať skusmo:

Algoritmus numerického riešenia:

1. zvolíme si nejakú hodnotu ω
2. riešime DR s počiatočnými podmienkami $y_\omega(0) = 0$ a $y'_\omega(0) = 1$
3. ak sa "trafíme" a dostaneme $y_\omega(L) = 0$, tak nami zvolená frekvencia ω je jednou z vlastných frekvencií.
   inak go to 1

Metóda streľby – homogénna struna ($\alpha \equiv 1$)

Primitívne hľadanie vlastnej frekvencie:



$L = 1$

Zvolené frekvencie:

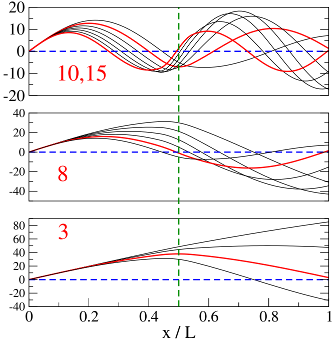
$$\omega = \frac{2\pi}{L}\frac{i}{8}, \quad i = 1, 2, 3, 4, \ldots 15$$

Vlastné frekvencie zodpovedajú

$$i = 4, 8, 12, \ldots$$

Poznámka. Všimnime si, že diferenciálna rovnica je homogénna. Ak pre danú frekvenciu poznáme riešie $y(x)$, tak je riešením aj $Ay(x)$ pre ľubovoľnú konštantu $A \neq 0$.

Metóda streľby - nehomogénna struna



Zložitejšia úloha:

$$\frac{\partial^2 y(x)}{\partial x^2} = -\alpha(x)\omega^2 y(x)$$

$$\alpha(x) = \begin{cases} 1 & 0 \le x \le 0.45L \\ 4 & 0.45L \le x \le 0.55L \\ 1 & 0.55L \le x \le L \end{cases}$$

Zvolené frekvencie:

$$\omega = \frac{2\pi}{L}\frac{i}{8}, \quad i = 1, 2, 3, 4, \ldots 15$$

Riešenia sú len približné, samozrejme je možné získať úplne presné frekvencie.

Metóda streľby

Predchádzajúce príklady nás naučili:

- Hodnota na konci struny

  $$y_\omega(L)$$

  mení znamienko, keď frekvencia ω narastá.
- Pre veľmi malé frekvencie je $y_\omega(L)$ "celkom určite" kladné.

Tieto všeobecné pravidlá môžeme využiť pre zrýchlenie algoritmu.

Metóda streľby - rýchlejší algoritmus

Aby sme nemuseli frekvenciu hľadať naslepo, využijeme metódu delenia intervalu.

1. nájdeme skusmo dve frekvencie $\omega_1 < \omega_2$ také, že

   $$y_{\omega_1}(x = L) \times y_{\omega_2}(x = L) < 0$$

   Potom vieme, že aspoň jedna vlastná frekvencia leží medzi nimi:

   $$\omega_1 < \omega < \omega_2$$

2. Zvolíme

   $$\omega' = \frac{\omega_1 + \omega_2}{2}$$

3. Ak

   $$y_{\omega_1}(x = L) \times y_{\omega'}(x = L) < 0, \qquad \text{tak} \qquad \omega_2 = \omega'$$

   Inak $\omega_1 = \omega'$

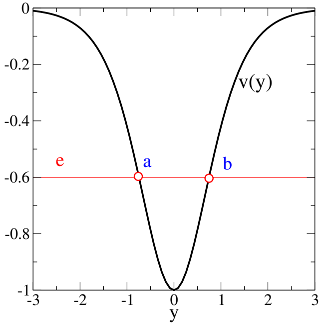
4. goto 1 s novými odnotami ω_1 a ω_2

Algoritmus zastavíme, ak napr. $\omega_2 - \omega_1 < 0.00001$

Obsah

- Kvantová potenciálová jama - body návratu
- Metóda streľby:
  - harmonický oscilátor
  - dvojitý harmonický oscilátor
  - zovšeobecnenie pre nesymetrický potenciál
- Úloha

Potenciálová jama a body návratu



Body návratu:

$$V(a) = V(b) = E_n$$

Vlnová funkcia:

- osciluje medzi bodmi návratu, kde $E > V(x)$
- exponenciálne klesá v oblastiach $x < a$ a $x > b$ (mimo potenicálovej jamy, $V(x) > E$).

Hľadanie vlastných energií viazaných stavov

Predpokladajme najprv, že potenciál symetrický:

$$V(x) = V(-x)$$

Potom je vlnová funkcia alebo symetrická, alebo antisymetrická:

$$\Psi(x) = \pm\Psi(-x)$$

Pre vlastný stav zatiaľ nenormovaný musí platiť:

$$\Psi(x=0) = 1 \quad \Psi'(x=0) = 0 \quad \mathrm{ak} \quad \Psi(x) = +\Psi(-x)$$

$$\Psi(x=0) = 0 \quad \Psi'(x=0) = 1 \quad \mathrm{ak} \quad \Psi(x) = -\Psi(-x)$$

Okrem toho:

$$\Psi(x \to \pm\infty) = 0$$

Schematický algoritmus

- zvolím si skúšobnú energiu E blízko dna potenciálovej jamy.
- zvolím si bod $x = a$ dostatočne "ďaleko" od bodu návratu, takže môžem predpokladať, že $\Psi(a)$ aj $\Psi'(a)$ je veľmi malá.
- integrujem Schrödingerovu rovnicu smerom k $x = 0$. Riešenie bude exponenciálne rásť až po bod návratu, potom začne oscilovať.
- Nájdem $\Psi(x = 0)$ a $\Psi'(x = 0)$.
- Ak je splnená niektorá z podmienok (4), mám vlastnú energiu.
- Inak zmením energiu E a začnem znova.

Samozrejme môžem celú úlohu riešiť Newtonovou met'odou delenia intervalu v E: $\Psi(x = 0)$ totiž musí meniť znamienko v intervale $E_{2n+1} \pm \delta E$ a $\Psi'(x = 0)$ mení znamienko v intervale $E_{2n} \pm \delta E$.
Tento algoritmus pracuje pre symetrický potenciál. Asymetrický potenciál vyžaduje väčšiu starostlivosť.

Príklad: harmonický oscilátor

$$-\frac{\partial^2\Psi}{\partial\xi^2} + \xi^2\Psi = e\Psi$$

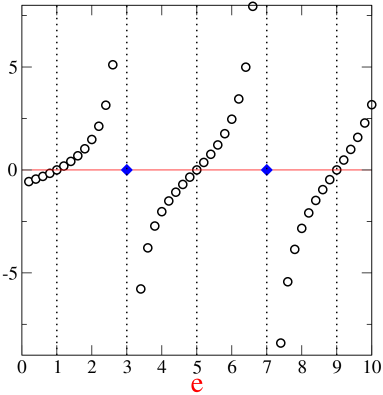
Jednotkou energie je $V_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$
Runge-Kutta: dve rovnice,

$$\frac{\partial y_1}{\partial\xi} = y_2(\xi)$$

$$\frac{\partial y_2}{\partial\xi} = \left[\xi^2 - e\right] y_1(\xi)$$

Voľme energie $e = 0.1, 0.2, \ldots$

Harmonický oscilátor - vlastné energie



Namiesto derivácie plotujeme logaritmickú deriváciu

$$\frac{1}{\Psi(x)} \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$$

Dôvod: v numerickom riešení nevieme normovať $\Psi(x)$.
Nevýhoda: logaritmická derivácia diverguje tam, kde $\Psi(x) = 0$.

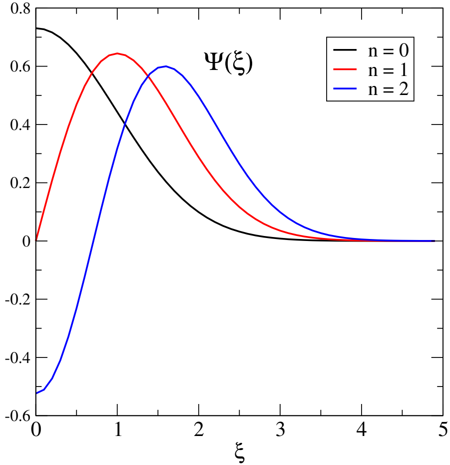
Takže jej nulové body určujú párne riešenia, a body divergencie nepárne riešenia.

Toto samozrejme platí len ak je potenciál symetrický.

Ľahko nájdeme vlastné energie v bodoch

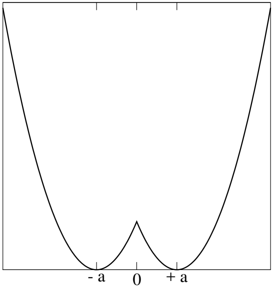
$$E_n = \frac{1}{2}\hbar\omega e, \qquad e = 1, 3, \ldots$$

Harmonický oscilátor - vlastné stavy



Normované tak, aby $\int d\xi |\Psi(\xi)|^2 = 1$.

Dva harmonické oscilátory



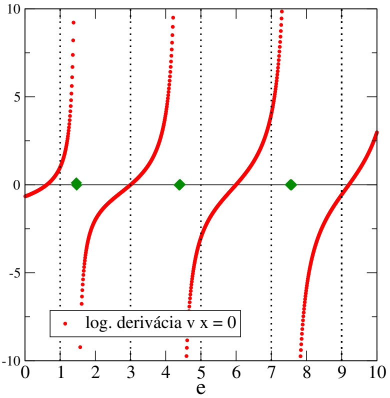
$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 (|x| - a)^2$$

Dva špeciálne prípady:

$a \equiv 0$
len jeden harmonický oscilátor,
$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$

$a \gg 1$
dva izolované harmonické oscilátory,
$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$,
ale samozrejme každá energia je $2\times$ degenerovaná.

Hľadanie vlastných energií takejto potenciálovej jamy.



$a = 1$. Ukázaná je logaritmická derivácia

$$\frac{1}{\Psi(x)} \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x}$$

a energie, pre ktoré je $\Psi(x = 0) = 0$.

Vlastné energie [Merzbacher]

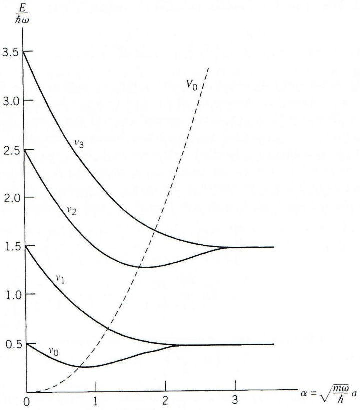
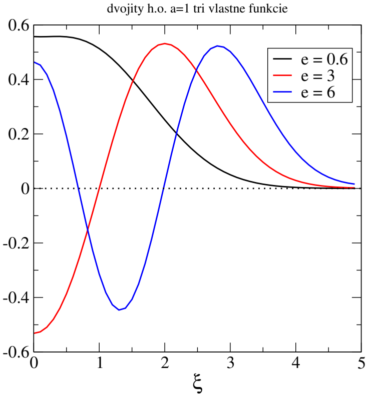


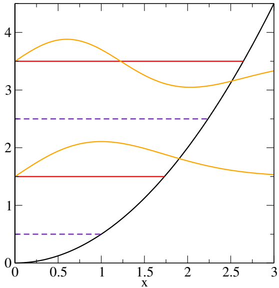
Figure 8.5. The energy $E = \hbar\omega\left(\nu + \frac{1}{2}\right)$ in units of $\hbar\omega$ versus $a = \sqrt{m\omega/\hbar}\, a$ for the four lowest energy eigenstates of the double oscillator, $V(x) = m\omega^2(|x| - a)^2/2$. For comparison with the energy levels, the dashed curve shows the barrier height V_0.

Výpočet vlastných stavov takejto potenciálovej jamy.



Pre $a = 1$, nájdeme niekoľko najnižších stavov.

Harmonický oscilátor definovaný len pre $x > 0$



Položme do bodu $x = 0$ nekonečne tenkú a nepriepustnú bariéru. Ako sa zmení spektrum a vlastné funkcie harmonického oscilátora?

Pretože $\Psi(x = 0) = 0$ pre všetky viazané stavy, prežijú len nepárne vlastné funkcie, a k nim zodpovedajúce vlastné energie $E = \hbar\omega(2n + 3/2)$.

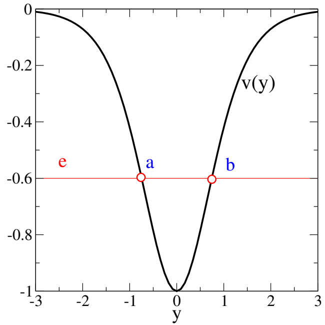
Úlohu nie je treba ani počítať, pretože stav ktorý má $\Psi(x = 0) = 0$, "nevidí" bariéru (tá je nekonečne tenká), takže niet dôvod, aby sa zmenil a prestal byť vlastným stavom.

Obrázok ukazuje preživšie vlastné stavy a k nim zodpovedajúce vlastné funkcie.

Zovšeobecnenie

Niekedy nemáme symetrický potenciál. Vtedy je treba "zošívať" riešenie v bodoch návratu:
Pre danú energiu riešime Schrödingerovu rovnicu dvakrát. Začneme z dvoch zaručene nulových bodov naľavo a napravo od potenciálovej jamy. Riešenia budú smerom k jame rásť, a v po prechode bodu návratu začnú oscilovať tak ako v prípade harmnického oscilátora. Vlastná energia je tá, pre ktorý obe riešenia v jame "splynú". Matematicky, porovnáme logaritmckú deriváciu oboch riešení v bodoch návratu.

Potenciálová jama a body návratu



Body návratu:

$$V(a) = V(b) = E_n$$

Vlnová funkcia:

- osciluje medzi bodmi návratu, kde $E > V(x)$
- exponenciálne klesá v oblastiach $x < a$ a $x > b$ (mimo potenicálovej jamy, $V(x) > E$).

Zovšeobecnenie

Niekedy nemáme symetrický potenciál. Vtedy je treba "zošívať" riešenie v bodoch návratu:
Pre danú energiu riešime Schrödingerovu rovnicu dvakrát. Začneme z dvoch zaručene nulových bodov naľavo a napravo od potenciálovej jamy. Riešenia budú smerom k jame rásť, a v po prechode bodu návratu začnú oscilovať tak ako v prípade harmnického oscilátora. Vlastná energia je tá, pre ktorý obe riešenia v jame "splynú". Matematicky, porovnáme logaritmckú deriváciu oboch riešení v bodoch návratu.

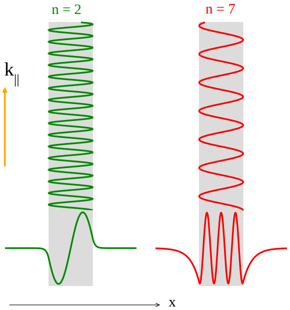
Úloha 8.3

- Nájdite metódou streľby prvé štyri vlastné stavy harmonického oscilátora
- Nájdite metódou streľby prvé štyri vlastné stavy dvojitého harmonického oscilátora

  $$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 (|x| - a)^2$$

  Ukážte, ako sa menia vlastné energie ako funkcie vzdialenosti a.

Viazané stavy na dielektrickej vrstve



Dielektrická vrstva má hrúbku $L = 1$ a index lomu $n = 3$.
Viazané stavy sa šíria vo vrstve s vlnovým vektorom $k_\parallel$
Disperzný vzťah pre EM vlnu
Vo vnútri vrstvy:

$$\frac{\omega^2}{c^2} n^2 = k_\parallel^2 + k_\perp^2$$

Mimo vrstvy

$$\frac{\omega^2}{c^2} = k_\parallel^2 - \kappa^2$$

Vlnová rovnica

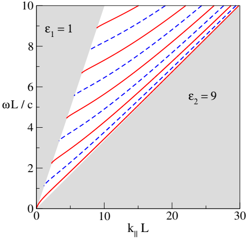
$$\frac{\partial^2 E(x)}{\partial x^2} = -\left[\frac{\omega^2}{c^2} n^2(x) - k_\parallel^2\right] E(x)$$

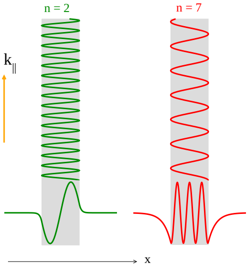
Viazané stavy na dielektrickej vrstve

Úloha je zložitejšia, lebo hľadáme disperzný vzťah

$$\omega = \omega(k_{\|})$$

Preto budeme úlohu riešiť pre zadaný vlnový vektor $k_{\|}$





Využijeme, že funkcia $E(x)$ zodpovedajúca vlastnej frekvencii

- Exponenciálne klesá smerom od vrstvy
- Je párna, resp. nepárna vzhľadom na zámenu $x \to -x$

Algoritmus

- Zvoľme x_0 dosť ďaleko od vrstvy (napr. $x_0 = -5$).
- Zvoľme počiatočné podmienky:

$$E(x = x_0) = 0, \qquad E'(x = x_0) = 0.1$$

- Zvoľme okrajovú podmienku v strede vrstvy ($x = 0$):
  pre párne riešenie (derivácia v strede vrstvy musí byť nulová):

$$E'(x = 0)$$

  pre nepárne riešenie (funkcia v strede vrstvy musí byť nulová):

$$E(x = 0)$$

- Riešime vlnovú rovnicu v intervale $x \in (x_0, 0)$

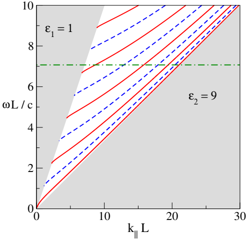
$$\frac{\partial^2 E(x)}{\partial x^2} = -\left[\frac{\omega^2}{c^2} n^2(x) - k_\parallel^2\right] E(x)$$

- Metódou streľby hľadáme také hodnoty $k_\parallel$, s ktorými splníme okrajovú podmienku pre $x = 0$.

Úloha 8.1

- Nájdite numericky prvých pať vlastných frekvencií homogénnej struny. Položte pre jednoduchosť $L = 1$.
- Použite rýchlejší algoritmus s delením intervalu.
- Nakreslite priebeh $y(x)$ pre získané vlastné stavy.
- Výsledky provnajte s presným analytickým riešením.

Úloha 8.2



- Nájdite numericky hodnoty $k_{\|} L$ pre prvých päť viazaných stavov pre
  - frekvenciu $\omega L/c = \sqrt{50} \approx 7.07$
  - hrúbku vrstvy $L = 1$
  - index lomu vrstvy $n = 3$
- Nakreslite priebeh EM poľa $E(x)$ pre dva vlastné stavy.