
3. naloga

Lastne energije Schrödingerjeve enačbe

MIHA SRDINŠEK

I. RADIALNI DEL SCHRÖDINGERJEVE ENAČBE

Numerično reševanje Schrödingerjeve enačbe je precej zahtevno, saj imamo singularni potencial in hkrati iščemo lastne energije. Samo reševanje enačbe poznamo in vemo, da obstaja analitična rešitev, do katere pridemo, če predpostavimo, da je rešitev oblike

$$\Psi_{n,l,m_l}(r, \theta, \phi) = \Phi_{n,l}(r) Y_{l,m_l}(\theta, \phi), \quad \Phi(r) = \frac{R(r)}{r}. \quad (1)$$

Enačbo torej razbijemo na radialni in sferični del. Pri čemer vemo da so rešitve za sferični del sferični harmoniki, med tem ko so rešitve radialnega dela, rešitve enačbe oblike

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} - \frac{2}{x} + \frac{l(l+1)}{x^2} - \epsilon \right] R(x) = 0, \quad (2)$$

z robnima pogoje $R(0) = 0$ in $R(\infty) = 0$, če uvedemo nove spremenljivke $x = \frac{r}{a}$ in $\epsilon = \frac{E}{E_0}$ in je a Bohrov radij, E_0 pa energija osnovnega stanja.

Numerično se že znamo lotiti tega problema, tako da jo razbijemo na dva dela in rešujemo z metodo "Runge-Kutta" v obliki

$$\frac{dR}{dx} = z, \quad (3a)$$

$$\frac{dz}{dx} = \left[-\frac{2}{x} + \frac{l(l+1)}{x^2} - \epsilon \right] R(x). \quad (3b)$$

Pri tem moramo posebno skrb nameniti singularnosti, ki jo bomo aproksimirali z nekim polinomom. Lahko recimo rečemo $R(x) = a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + \dots$, to vstavimo v našo enačbo in rešimo sistem

$$-(2a_2 + 6a_3x + 12a_4x^2 + \dots) + \left[-\frac{2}{x} + \frac{l(l+1)}{x^2} - \epsilon \right] (a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + \dots) = 0, \quad (4)$$

ki se poenostavi, če pogledamo osnovno stanje pri $l = 0$, saj ne dobimo $a_1 = 0$. V takem

primeru potem s pomočjo *Mathematice* na hitro rešimo sistem in dobimo pogoje

$$a_2 = -a_1, \quad (5a)$$

$$a_3 = -\frac{1}{6} \left(2a_2 + \epsilon a_1 \right) \text{ in} \quad (5b)$$

$$a_4 = -\frac{1}{12} \left(2a_3 + \epsilon a_2 \right), \quad (5c)$$

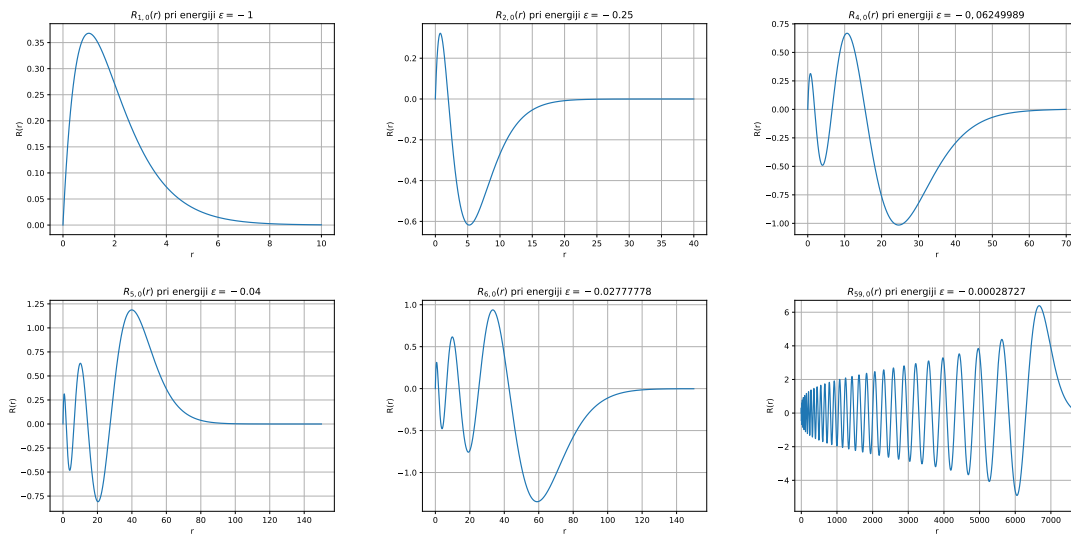
pri čemer vzamemo, da je $a_1 = 1$. S tem torej simuliramo tiste prve točke, pri katerih bi sicer dobili deljenje z ničlo. To opustimo najhitreje možno glede na metodo. Pri metodi Runge-Kutta bomo to opustili že po prvem koraku, med tem ko bomo morali pri metodi, ki jo bom še opisal, na tak način izračunati kar tri korake.

Metoda, ki sem jo omenjal se imenuje metoda Numerova in je za en red natančnejša od 4. reda metode Runge-Kutta. Definiramo jo na kvadratni mreži (x, y) s predpisom

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2(x) \right] y(x) = 0 \rightarrow k^2(x) = \frac{2}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} + \epsilon, \quad (6a)$$

$$y_{i+1} = \frac{2(1 - \frac{5h^2}{12}k_i^2)y_i - (1 + \frac{h^2}{12}k_{i-1}^2)y_{i-1}}{1 + \frac{h^2}{12}k_{i+1}^2}. \quad (6b)$$

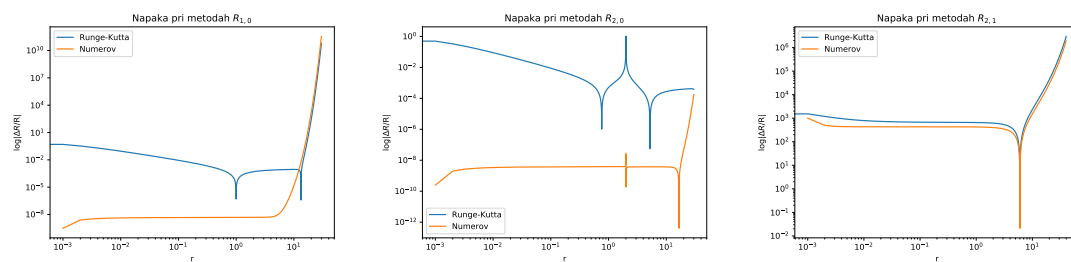
Pri čemer že v prvem koraku, s tem ko določimo mrežo, določimo vse k_i , prve tri $y_{1,2,3}$ pa določimo s pomočjo približka opisanega zgoraj. Določiti jih moramo zato, ker bi sicer dobili $k(0)$, kjer ima k pol.



Slika 1: Slike prikazujejo rešitve pri različnih energijah in kvantnih številih.

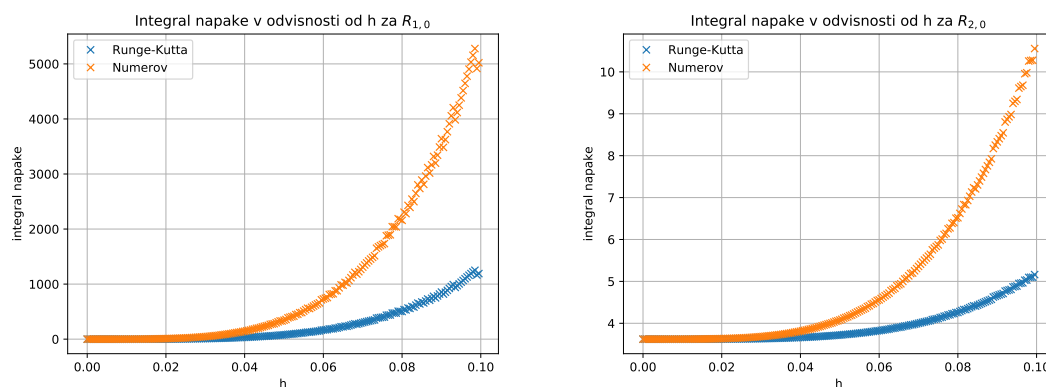
Rešitve so prikazane na slikah 1, kjer vidimo zgolj tiste pri $l = 0$. To nam ni preveč zanimivo gledati, saj jih tako težko primerjamo z analitičnimi rešitvami, za katere vemo da so prave. Prave rešitve, ki jih dobimo v literaturi zato primerjamo z našimi in dobimo sledeča odstopanja v odvisnosti od razdalje, prikazana na slikah 2. Pri tem primerjamo dva različna načina reševanja in pri $R_{2,1}$ v singularnosti uporabimo kar približek za $l = 0$.

Na tak način dobimo napake prikazane na slikah 2. Vidimo, da se tu numerov izkaže za dosti boljše metodo in da praviloma s časom napaka narašča. Pri tem smo morali paziti, da smo normirali analitične funkcije, ki niso bile normirane, sicer smo dobili dosti prevelike napake.



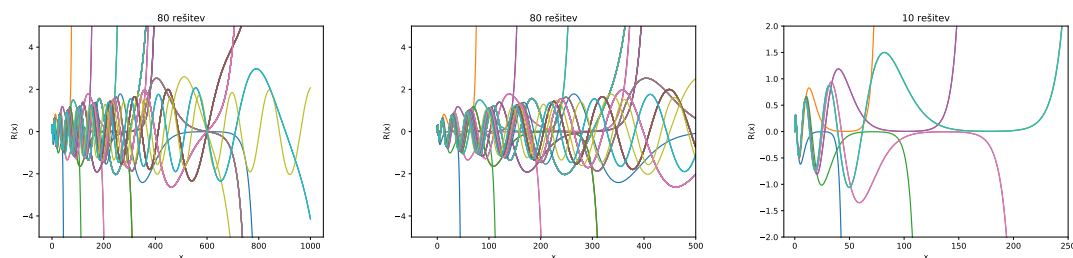
Slika 2: Slike prikazujejo napako za različni metodi.

Po tem nas lahko zanima tudi kako korak vpliva na natančnost. Pri tem si pomagamo s trikom, da izračunamo integral napake skozi celotno območje pri različnih dolžinah korakov h . tem bomo videli kako izbrati korak da bomo bolj natančni. Rezultat je prikazan na slikah 3. Zanimivo je to, da je metoda Numerova dosti bolj občutljiva na spremembo dolžine koraka od metode Runge-Kutta.



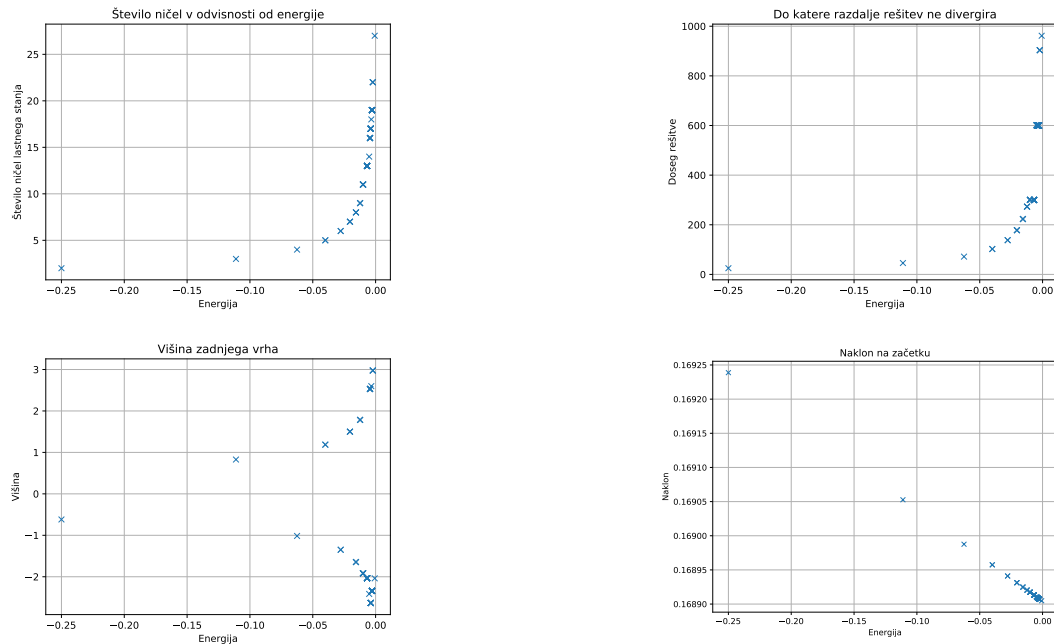
Slika 3: Slike prikazujeta integral napake v odvisnosti od dolžine koraka za obe metodi.

Na podoben način si lahko pogledamo še mnogo drugih karakteristik tega sistema. Lahko si recimo pogledamo kako se povečuje število ničel z energijo, kako se povečuje maksimalni radij z energijo (maksimalni radij bomo določili s točko, kjer se prične divergenca) in kako se povečuje maksimalna verjetnost z energijo. Vse to bomo počeli s pomočjo tega, da zapišemo poseben program, ki nam poišče 80 rešitev pri različnih energijah. Program zapišemo tako, da izbrani metodi predlagamo vsakič drugačno energijo. Ko metoda skonvergira, potem dobljeno rešitev vrnemo v metodo in rahlo podaljšamo dolžino. S tem najdemo lepe rešitve, ki so prikazane na slikah 4.



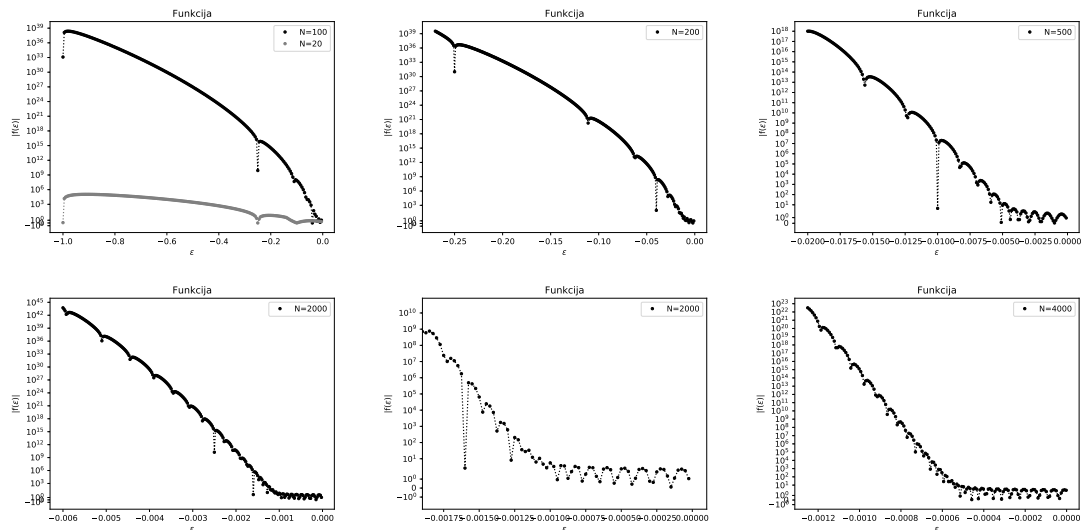
Slika 4: Slike prikazujejo ogromno rešitev pri različnih energijah.

Za te rešitve so karakteristike prikazane na slikah 5. Pri tem smo jim dodali še začetni naklon, ki smo ga določili s z začetnim skokom v y smeri po prvih 20 korakih v x smeri.



Slika 5: Slike prikazujejo karakteristike rešitev v odvisnosti od lastnih energij.

Na slikah vidimo, da število ničel močno naraste čisto v bližini ničelne energije, kar lahko vidimo tudi če si pogledamo vrednost funkcije v vsaki točki. zanimivo je da podobno karakteristiko opazujemo pri dosegu in celo pri maksimalnih vrednostih. Tega verjetno nebi pričakovali. Za konec si lahko pogledamo kako izgleda funkcija, če jo izrišemo na slikah 6. Vidimo da je potrebno izbrati pameten čas, da ničlo točno zadaneemo. Ko je čas prekratek zadevamo zgolj preseke z osjo, če je dovolj velik pa vidimo rešitve.



Slika 6: Slike prikazujejo funkcijo pri različnih skalah in različno velikih "časih". Lepo se vidi približne položaje ničel.

II. HELMHOLTZOVA ENAČBA

Če se ukvarjamo s propagacijo monokromatske svetlobe uporabimo tako imenovano Helmholtzovo enačbo, ki je zelo podobna Schrödingerjevi enačbi. Enačba se glasi

$$\left(\nabla^2 + n(\vec{r})^2 k^2\right) \Psi(\vec{r}) = 0, \quad (7)$$

če je $n(\vec{r})$ lomni količnik, k pa brezdimenzijsko valovno število. Podobno kot smo to storili pri Schrödingerjevi enačbi, tudi tu vzamemo nastavek, za iskanje lastnih načinov valovanja v svetlobnih vlaknih

$$\Psi(x) = \left(\frac{R(x)}{\sqrt{x}}\right) e^{i\lambda z}. \quad (8)$$

Za radialno simetrična stanja potem dobimo enačbo

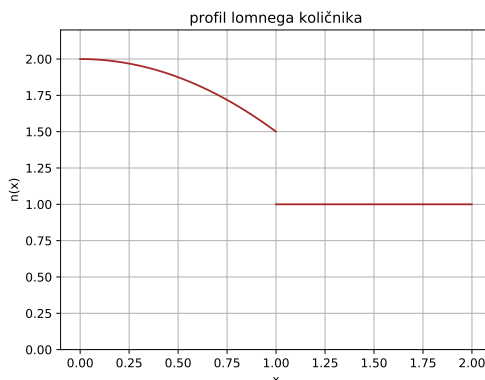
$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{4x^2} + n(x)^2 k^2 - \lambda^2\right] R(x) = 0. \quad (9)$$

Ta oblika enačbe pa nam je že doro znana iz prejšnje naloge, ko smo se naučili reševanja z metodo Numerova. Upoštevati moramo še to kaj nam predstavlja $n(x)$

$$n(x) = 2 - \frac{1}{2}x^2, \quad \text{ce } x < 1 \quad (10a)$$

$$n(x) = 1, \quad \text{ce } x > 1. \quad (10b)$$

Če si ga izrišemo za boljšo predstavo, izgleda kot na sliki 7.

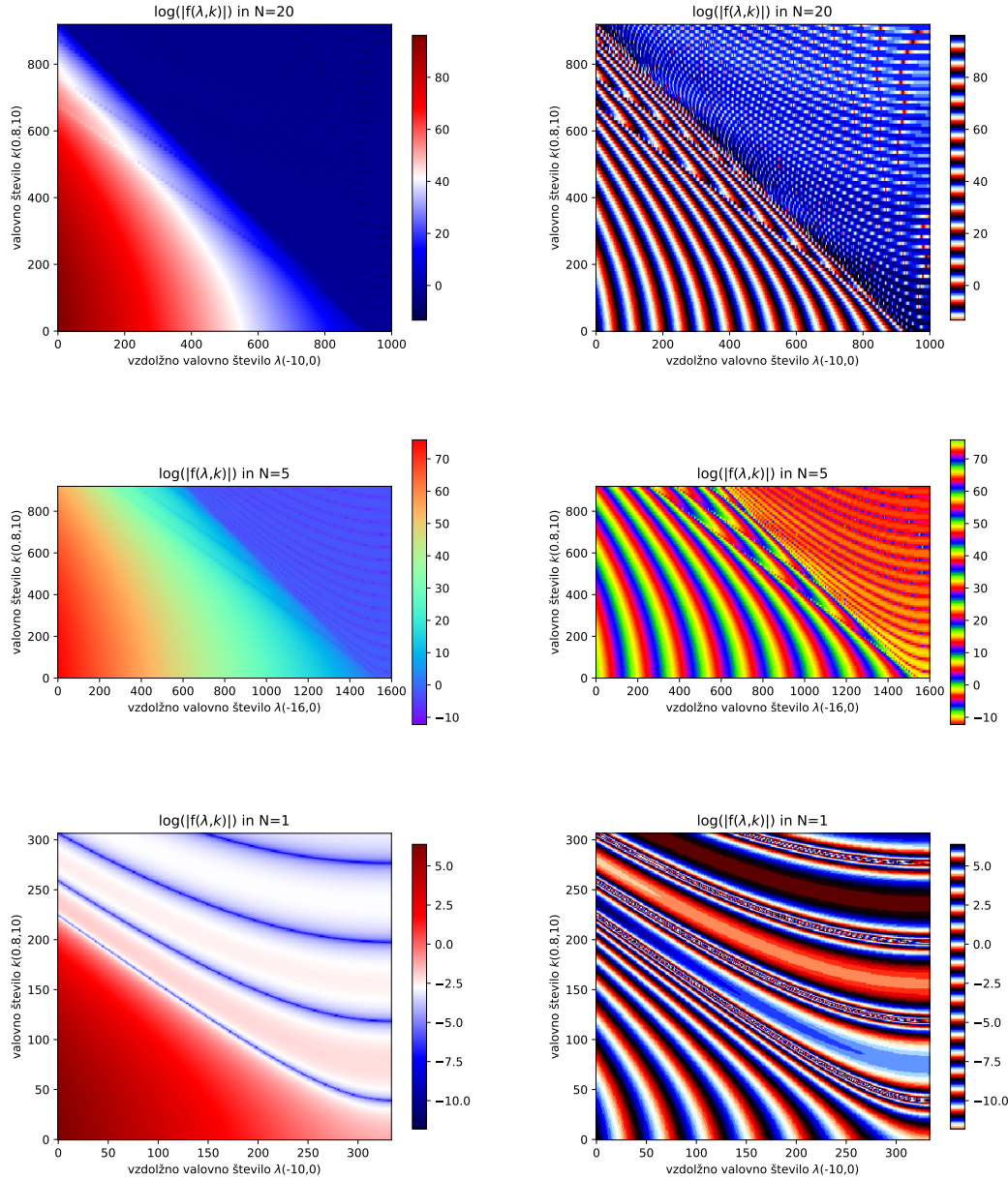


Slika 7: Profil lomnega količnika

Tako kot bi to morali nariditi tudi pri prejšnji nalogi, si sedaj najpej izrišemo vrednosti funkcije v odvisnosti od λ in k pri različnih časih. Tako bomo namreč dobili občutek za to kje in kako sploh iskati. Izrišemo si rezultate prikazane na slikah 8. Tam lepo vidimo karakteristiko našega problema. Pri tem moramo seveda zopet aproksimirati vrednost funkcije v prvih treh korakih.

Prva stvar, ki jo opazimo je to, da imamo premico, ki ločuje naš fazni diagram na dva dela. Na enem delu nam rešitve divergirajo, med tem ko nam na drugem delu ne glede na to koliko časa si vzamemo in kakšna k in λ imamo rešitev ostane zelo blizu ničle. Očitno je da smo s tem našli periodične rešitve, to lahko vidimo tudi iz tega, da pogledamo kakšna morata biti λ in k , da sploh dobimo "vezana stanja". Veljati mora namreč $n(x)k^2 \cdot \lambda^2 < 0$. Ker po oddaljenosti

$x > 1$ $n(x)$ zasede vrednost 1, lahko ocenimo, da dobimo vezana stanja tam, kjer je λ večji od k . Iz tega je torej očitvidno, da je ta meja začrtana s tem pogojem in hkrati, da so desno od nje periodične rešitve - prosta stanja- in desno od nje neperiodična stanja, med katerimi lahko iščemo naše funkcije. Neperiodična stanja izgledajo tako kot periodična, le da potem kar na enkrat divergirajo. Na slikah lahko lepo vidimo strukturo periodičnih rešitev. Vidimo kje dosežejo vrednost 0 pri določenem času. Izrisane pa imamo štiri različne čase.

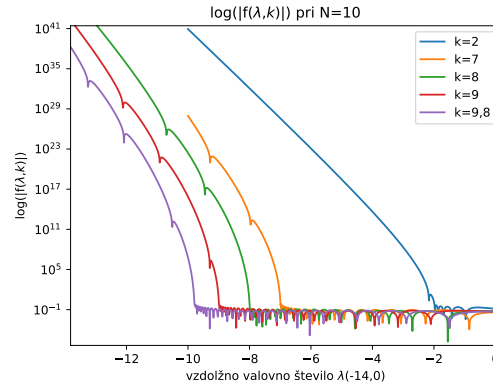


Slika 8: Slike prikazujejo funkcijo pri različno velikih "časih". Lepo se vidi približne položaje ničel.

Vidimo tudi, da pri času velikostnega reda 1, kjer je ravno skok v $n(x)$ dobimo čisto drugačno sliko, kot jo vidimo po daljšem času, saj še nimamo tako jsane ločnice med "vezanimi" in "prostimi" stanji. Če pa si pogledamo grafa z daljšimi časi lepo vidimo disperzijsko realcijo, ki jo iščemo. Vidimo namreč tri tančice komaj opazne male črtice, ki se vijejo navzdol rahlo pod kotom glede na mejo med "vezanimi" in "prostimi" stanji. Tam imamo med vezanimi stanji

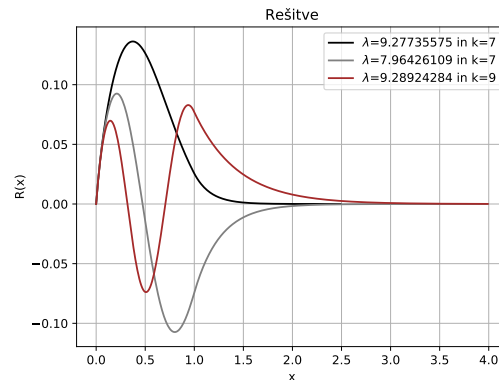
ničle po izbranem času, tam imamo stanja, ki bodo zadoščala našemu pogoju $R(\infty) = 0$. To se še posebej lepo vidi na sredinskih slikah, kjer lahko jasno razločimo tri črte. Na desnih slikah pa vidimo akko te črte zvijajo strukturo funkcije in kako morda zvijajo tudi "proste" rešitve.

Da si bomo to strukturo lažje predstavljali, si lahko ogledamo tudi nekaj prečnih prereзов, kjer bodo te rešitve dosti bolj vidne. To vidimo na sliki 9.



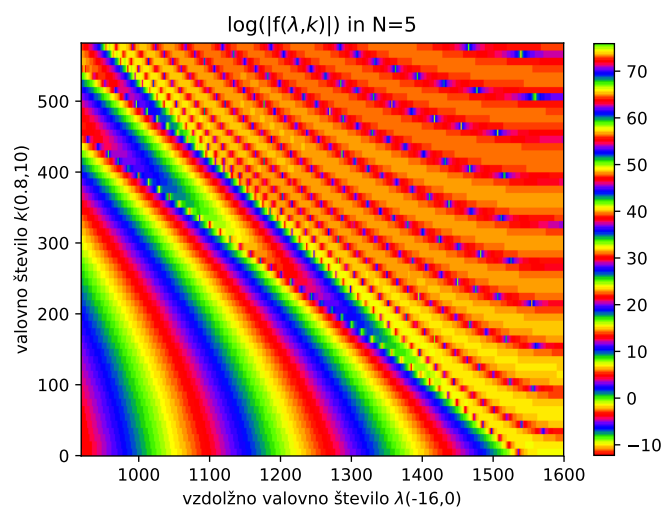
Slika 9: Na sliki je prikazanih nekaj prečnih prereзов grafov 8.

Zdaj vemo, da imamo očitno tri rešitve, točno vemo kako izgleda disperzijska relacija in zato jih lahko izrišemo in rešimo ta problem. Rešitev je prikazana na sliki 10.



Slika 10: Na sliki so prikazane tri rešitve, ki smo jih napovedovali.

Če si funkcijo pogledamo še malo pobližje, kot recimo na sliki 11, vidimo, da različne vrste rešitev prihajajo vsaka iz svojih repkov na desni strani slike. Poleg tega lahko na tak način na tej sliki približno določimo, do kje imamo zgolj eno vrsto vezanih stanj (t.i. *singlemode fiber*). To imamo na področju od približno $k = 2,6$ do približno $k = 5,4$.



Slika 11: *Povečana slika funkcije.*