

Projekt nr C.7.6

Testowanie efektywności metod różnicowych rozwiązania równania Schrödingera (przykłady rozwiązywalne analitycznie)

Wprowadzenie

Jednowymiarowe stacjonarne równanie Schrödingera ma postać:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

gdzie $V(x)$ jest potencjałem, dla którego szukamy rozwiązania, a E jest nieznaną wartością własną energii dla danego poziomu energetycznego w tym potencjale.

Rozwiązania do każdej wartości własnej E powinny spełniać zadane dla danego potencjału warunki brzegowe. Najczęściej są to warunki znikania funkcji falowej $\Psi(x)$ dla $x \rightarrow \pm\infty$. Równanie (1) jest rozwiązywalne analitycznie dla kilku (może kilkunastu) postaci potencjału i często występuje potrzeba numerycznego wyznaczenia poziomów energetycznych i odpowiadających im funkcji falowych. Jedną z częściej stosowanych metod wyznaczania wartości i funkcji własnych jest tzw. metoda wstrzeliwania się (shooting method). Polega ona na tym, że bierze się jeden z warunków brzegowych jako warunek początkowy i całkuje się numerycznie równanie (1) zmieniając wartość energii E tak długo aż nastąpi „wstrzelenie się” i zostanie spełniony drugi warunek brzegowy.

Najczęściej przeszukiwanie wartości E następuje ze stałym krokiem i sprawdzanie czy nie wystąpił poziom energetyczny. Kryterium jest najczęściej zachowanie się funkcji w okolicy drugiej wartości brzegowej. Jeżeli funkcja powinna w danym miejscu przyjąć wartość zero, i obserwujemy, że dla niższej wartości energii E_1 scałkowanie równania (1) daje wartości jakiegoś znaku, zaś scałkowanie z energią $E_1 + \Delta E$ daje wartości przeciwnego znaku to jest to widomy objaw tego, że pomiędzy tymi wartościami energii znajduje się wartość dla której warunek brzegowy jest spełniony. Następuje wtedy etap udokładniania wartości własnej np. przez połowienie kroku ΔE .

Równanie (1) można przepisać w postaci:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - \frac{2m[E - V(x)]}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad (2)$$

W takiej postaci równanie to jest szczególnie wygodne do całkowania numerycznego metodą Numerowa (patrz dodatek). Dla dalszego ułatwienia można przyjąć wartości $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$.

Zadania do wykonania

1. Zbudować procedurę do całkowania równania (2) metodą Numerowa, startującą od warunku początkowego w $-X_d$, X_d jest dolną granicą rozpatrywanego w zadaniu przedziału. Rozpatrywany przedział należy podzielić na 1000 punktów, z których punkty 1-100 i 900-1000 stanowią obszary, w których następuje wygaszenie funkcji falowej. Aby to zapewnić w podanych powyżej punktach należy zdefiniować potencjał wielokrotnie wyższy niż rozpatrywane wartości potencjału badanego i wartości własne energii. W obszarze punktów 100-800 potencjał zadawany jest przez użytkownika, bądź wzorem bądź w jakikolwiek inny sposób (zaznaczenie przebiegu kursorem, podanie przedziałów i odpowiadających im wartości stałych i in.). Do rozpoczęcia całkowania metodą Numerowa potrzebne są wartości w dwóch pierwszych punktach. Wartości te wygenerować korzystając z asymptotycznej postaci funkcji falowej przy stałym, dużym potencjale V_m zadany w punktach 1-100. Odpowiedni wzór ma postać:

$$\psi(x) \approx A \exp[(V_m - E)x]$$

i jest stosowny dla x bliskich dolnej granicy rozpatrywanego przedziału x . Kryterium wykrywania poziomów energetycznych jest zmiana znaku funkcji falowej na drugim (górnym) końcu rozpatrywanego przedziału.

2. Korzystając z powyższej procedury wyznaczyć cztery najniższe poziomy energetyczne dla potencjału oscylatora harmonicznego:

$$V(x) = 5x^2 \quad -4 < x < 4$$

dla którego znane są wyniki analityczne.

3. Wyznaczyć cztery najniższe poziomy energetyczne dla potencjału schodkowego postaci:

$$V(x) = 0 \quad \text{dla } -4 < x < -1, \quad V(x) = 100 \quad \text{dla } -1 < x < 1, \quad V(x) = 20 \quad \text{dla } 1 < x < 4$$

Wejście

Do programu powinna być wprowadzona startowa wartość energii dla której należy zacząć poszukiwania, krok energetyczny z jakim należy zwiększać energię, oraz dokładność wyznaczania poszczególnych poziomów energetycznych. Sam potencjał winien być zadawany przez odpowiednią procedurę, wypełniającą wektor wartości, w których trzymany jest potencjał. Jako daną wejściową do tej procedury musi być podany odstęp przestrzenny między punktami bramnymi do obliczeń.

Wyjście

Program powinien drukować bieżącą wartość energii dla której całkuje równanie i wartość funkcji falowej na górnym końcu przedziału przy przeszukiwaniu ze stałym krokiem. Po znalezieniu poziomu powinien wypisać odpowiednią informację o przejściu do udokładniania, zaś po osiągnięciu dokładności wartość znalezionej energii własnej. Program powinien zapamiętać postać funkcji falowej dla danego poziomu i przejść do szukania następnego. Etapem końcowym jest wypisanie znalezionych poziomów i zrobienie wykresów wyliczonych dla nich funkcji falowych.

Dodatek

Metody całkowania dedykowane dla równań drugiego rzędu

Rozważmy równanie różniczkowe w postaci:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = f(x, y) \quad (\text{A1})$$

Zastosowani rozwinięcia w szereg Taylora dla standardowego przybliżenia drugiej pochodnej, tzn. trzypunktowej formuły różnicowej daje:

$$\frac{y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}}{h^2} = y_n'' + \frac{h^2}{12} y^{(IV)} + O(h^4) \quad (\text{A2})$$

Czwarta pochodna może zostać wyliczona z samego równania (A1):

$$y^{(IV)} = \frac{d^2}{dx^2} f(x, y) = \frac{f(x_{n+1}, y_{n+1}) - 2f(x_n, y_n) + f(x_{n-1}, y_{n-1})}{h^2} \quad (\text{A3})$$

Wstawienie tego wzoru do (A2) i pomnożenie przez h^2 daje:

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + f(x_n, y_n)h^2 + \frac{h^2}{12} [f(x_{n+1}, y_{n+1}) - 2f(x_n, y_n) + f(x_{n-1}, y_{n-1})] \quad (\text{A4})$$

Wzór ten może być wykorzystany na trzy sposoby:

1. Jako najprostsza metoda całkowania równań zawierających tylko drugą pochodną (np. równań dynamiki) po pominięciu części w nawiasie kwadratowym:

$$y_{n+1} = 2y_n - y_{n-1} + f(x_n, y_n)h^2 \quad (\text{A5})$$

2. Jako korektor z predyktorem w postaci wzoru (A5)
3. W klasycznej metodzie Numerova, gdy funkcja $f(x, y)$ ma postać:

$$f(x, y) = K(x)y + S(x) \quad (\text{A6})$$

Wtedy funkcję $f(x_{n+1}, y_{n+1})$ można przedstawić w postaci:

$$f(x_{n+1}, y_{n+1}) = K(x_{n+1})y_{n+1} + S(x_{n+1}) \quad (\text{A7})$$

Pozwala to wyliczyć y_{n+1} jako funkcję pozostałych wartości ze wzoru (A4). Ponieważ rozwinięcie (A2) zawiera tylko parzyste potęgi h , więc błąd metody Numerova jest rzędu szóstego (!), czyli jest on o rząd mniejszy niż dla metody Runge-Kutty czwartego rzędu.

Podstawienie wzoru A7 oraz jego odpowiedników dla n i $n-1$ do wzoru A4 daje:

$$\begin{aligned} y_{n+1} = & 2y_n - y_{n-1} + h^2[K(x_n)y_n + S(x_n)] + \\ & + \frac{h^2}{12}[K(x_{n+1})y_{n+1} - 2K(x_n)y_n + K(x_{n-1})y_{n-1}] + \\ & + \frac{h^2}{12}[S(x_{n+1}) - 2S(x_n) + S(x_{n-1})] \end{aligned} \quad (\text{A8})$$

Prowadzi to do następującego wzoru na y_{n+1} :

$$\begin{aligned} y_{n+1} \left[1 - K(x_{n+1})\frac{h^2}{12} \right] = & 2y_n - y_{n-1} + h^2[K(x_n)y_n + S(x_n)] + \\ & + \frac{h^2}{12}[K(x_{n-1})y_{n-1} - 2K(x_n)y_n] + \\ & + \frac{h^2}{12}[S(x_{n+1}) - 2S(x_n) + S(x_{n-1})] \end{aligned} \quad (\text{A9})$$

Dla $S(x)=0$ wzór ten przybiera szczególnie uproszczoną postać:

$$y_{n+1} \left[1 - K(x_{n+1})\frac{h^2}{12} \right] = 2y_n \left[1 - K(x_n)\frac{h^2}{12} \right] - y_{n-1} \left[1 - K(x_{n-1})\frac{h^2}{12} \right] + h^2 K(x_n)y_n \quad (\text{A10})$$

Po wprowadzeniu zmiennej pomocniczej: $u_n = y_n \left[1 - K(x_n)\frac{h^2}{12} \right]$ mamy:

$$u_{n+1} = u_n \left[2 + \frac{K(x_n)h^2}{1 - K(x_n)h^2/12} \right] - u_{n-1} \quad (\text{A11})$$

Literatura

- [1] S.Koonin, "Computational Physics"
- [2] L.Schiff, „Mechanika Kwantowa”