Univerza *v Ljubljani*
Fakulteta *za matematiko in fiziko*

Matematično-fizikalni praktikum

Osma naloga: *Robni problem lastnih vrednosti*

Simon Bukovšek, 28211067

Mainz, 11. december 2023

Profesor: prof. dr. Borut Paul Kerševan

Naloga: Robni problem lastnih vrednosti

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)?

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 določit 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 λ, 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 Neskončna potencialna jama

Najprej si poglejmo analitično rešitev problema. Imamo enačbo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi,$$

z robnima pogojema $\psi(-a/2) = \psi(a/2) = 0$. Analitično dobimo rešitev lažje, če jamo premaknemo za $a/2$, tako da je rob pri $x = 0$ in $x = 1$. Diferencialno enačbo ob predpostavki $E > 0$ reši nastavek

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx),$$

kjer je $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Robni pogoj pri $x = 0$, nam da $B = 0$, pri $x = a$ pa dobimo $A\sin(kx) = 0$. Sledi, da je $k_n = n\pi/a$, kjer je $n \in \mathbb{N}$. Lastne energije so potemtakem:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}n^2.$$

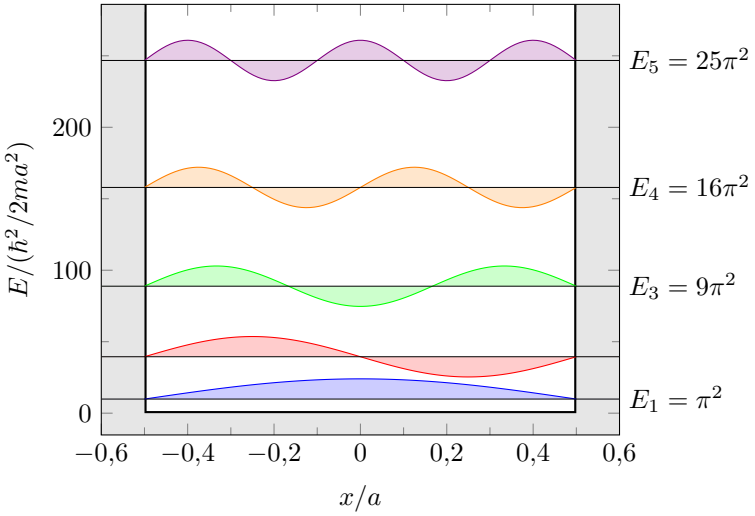
Konstanto A določimo iz normalizacije:

$$\int_{-a/2}^{a/2} |\psi(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1 \implies A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Lastne funkcije so torej:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right).$$

Prvih pet lastnih funkcij in lastnih vrednosti je prikazanih na Sliki 5. Za numerično iskanje lastnih funkcij

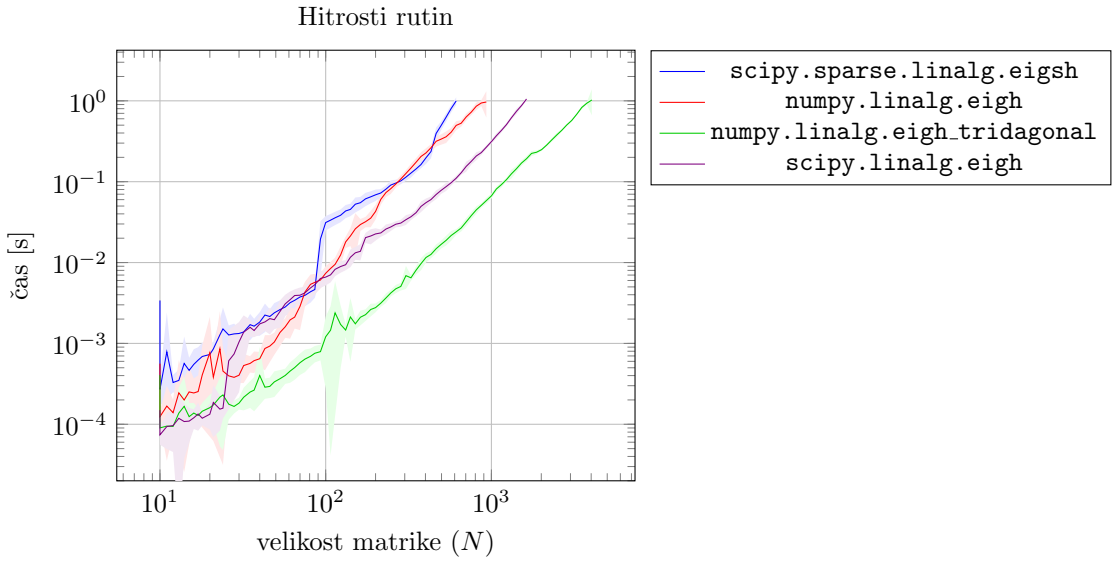


Slika 1: Prvih pet lastnih funkcij in lastnih vrednosti neskončne potencialne jame.

sem uporabil dve različni metodi. Diferenčna metoda je najenostavnejša, saj gre v našem primeru preprosto za iskanje lastnih vrednosti matrike:

$$H = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix},$$

saj imamo homogeni robni pogoj. Lastne energije so lastne vrednosti te matrike, lastni vektorji te matrike pa so vrednosti lastnih funkcij sistema izvrednotene na n enakomerno razporejenih točkah $f(x_n)$. V splošnejšem primeru, če potencial ne bi bil enak nič, bi matriki H odšteli diagonalno matriko z vrednostmi potenciala v točkah x_n. Za iskanje lastnih vrednosti imamo na voljo različne algoritme. Z njimi smo se ukvarjali že v eni od prejšnjih nalog, zato vemo, da se nam najbolj splača uporabiti kakšno, ki je že implementirana v `numpy` ali `scipy` knjižnici. Na žalost pa imamo še vedno precej široko izbiro. Za bolj informirano odločitev, sem po hitrosti primerjal štiri najočitnejše izbire: `scipy.linalg.eigh`, `numpy.linalg.eigh`, `scipy.sparse.linalg.eigsh` in `numpy.linalg.eigh_tridiagonal`. Prve dva sta splošna algoritma za iskanje lastnih vrednosti, tretji je specializiran za redke matrike (kar naša matrika je), zadnji pa je posebej namenjen tridiagonalnim matrikam. Pri tem testu sem vedno iskal samo prvo lastno vrednost. V primeru kvantne mehanike redko potrebujemo vse lastne energije, in tudi če jih, je zgornja polovica lastnih vrednosti pri diferenčni metodi nezanesljivih. Zato so pri tem testu v prednosti tisti algoritmi, ki lastnih vrednosti ne iščejo sočasno. Rezultati so prikazani na Sliki 2. Pričakovano je najhitrejši prav tisti algoritem, ki je specializiran za tridiagonalne matrike (v zelenem). Presenetljivo je algoritem za redke matrike (v modrem) najpočasnejši. Morda tudi pri velikosti 100×100 naše matrike še niso dovolj redke, da bi se lahko poznale njegove prednosti.



Slika 2: Primerjava različnih rutin za iskane lastnih vrednosti in lastnih funkcij tridiagonalne matrike. V svetlem je označeno odstopanje enega standardnega odklona na vzorcu desetih ponovitev. Pričakovano je najhitrejši prav tisti algoritem, ki je specializiran za tridiagonalne matrike (v zelenem).

Drugi uporabljen algoritem je bila strelska metoda. Pri tem gre v principu za iskanje ničel funkcije $f(E)$, kjer je E energija, $f(E)$ pa je vrednost funkcije $\psi(a/2)$, ki jo dobimo z integracijo Schrödingerjeve enačbe od $x = -a/2$ do $x = a/2$. Ta funkcija je prikazana na Grafu 3a, kjer so označene tudi ničle. Le-te predstavljajo lastne energije. V principu bi se problema lahko lotili, tako da bi računali to vrednost za vsako možno energijo, vendar je to skrajno potraten način. Obstajajo boljše metode za iskanje ničel, recimo bisekcija. Jaz sem se odločil za *sekantno metodo*. Ta je podobna Newtonovi metodi, le da namesto odvoda uporablja diferenco. Začnemo z dvema začetnima približkoma E_1 in E_2, naslednjo vrednost v zaporedji pa izračunamo kot:

$$E_{n+1} = E_n - f(E_n)\frac{E_n - E_{n-1}}{f(E_n) - f(E_{n-1})}.$$

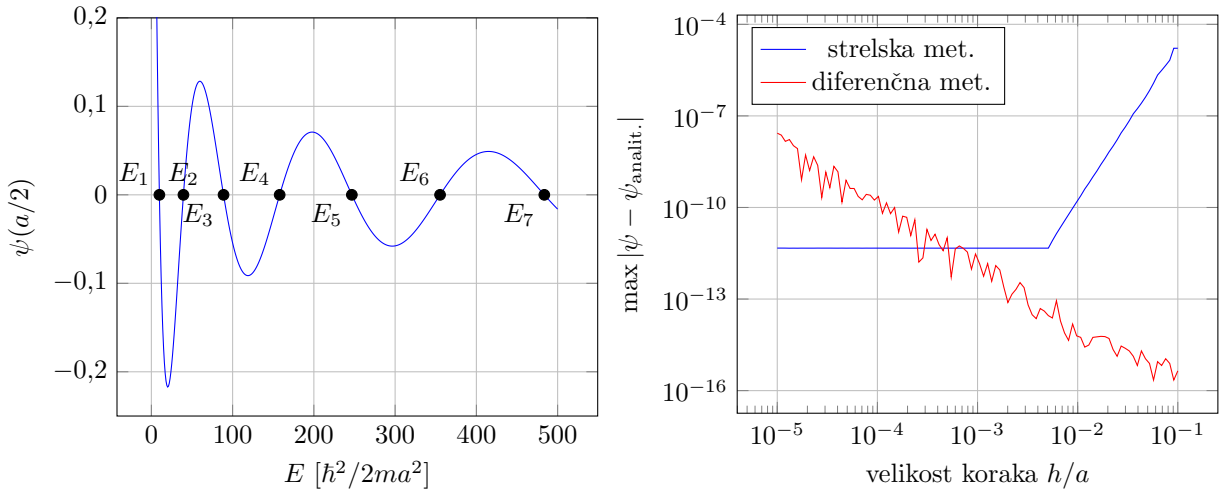
Ta metoda je v našem primeru zelo hitro konvergirala (seveda odvisno od začetnih ugibov), tipično je že s šestimi koraki prišla do napake reda 10^{-10}.

Sedaj smo usposobili obe metodi in ju lahko primerjamo. Pri obeh metodah lahko spreminjamo velikost koraka (zrnatost mreže) in ob tem opazujemo porabljen čas, natančnost izračuna energije in maksimalno odstopanje lastne funkcije. Pri strelski metodi je bila ciljna natančnost sekantne metode izbrana pri 10^{-10}, pri lastnih vrednostih pa te možnosti nisem imel, zato je natančnost takšna, kot jo dopušča float64 standard. Velikosti korakov sem spreminjal med 10^{-5} in 0,1, vse meritve se tičejo izključno prve lastne vrednosti pri $a = 1$ in $\hbar^2/2m = 1$.

Preden si začnemo ogledovati grafe moram reči še nekaj besed o primerjavi z analitično rešitvijo in o normalizaciji. Ko dobimo rešitev robnega problema, nam še vedno ostane ena prostostna stopnja glede vertikalnega raztezka. Ena možnost je, da funkcijo normiramo na $\max(f) = 1$, ampak s tem je normalizacija lahko odvisna od ene same nepravilne vrednosti. Idealno bi bilo, če bi lahko normaliziral integral kvadrata na ena in direktno primerjal z analitično rešitvijo. Težava se pojavi, ker izračun samega integrala prinese dodatne numerične napake. Rešitev, za katero sem se odločil, je normalizacija integrala rešitve na ena s pomočjo trapezne metode. Za primerjavo pa sem vzel analitično rešitev pri istih vrednostih x_n in jo normaliziral z isto metodo.

```
def normalize(x, y):
    return y / np.sqrt(np.trapz(y**2, x))
```

Sedaj se osredotočimo na rezultate. Na Sliki 4a je prikazan čas izvajanja obeh metod v odvisnosti od velikosti koraka. Metoda končnih diferenc je časovno približno stokrat hitrejša od strelske metode. Kaj

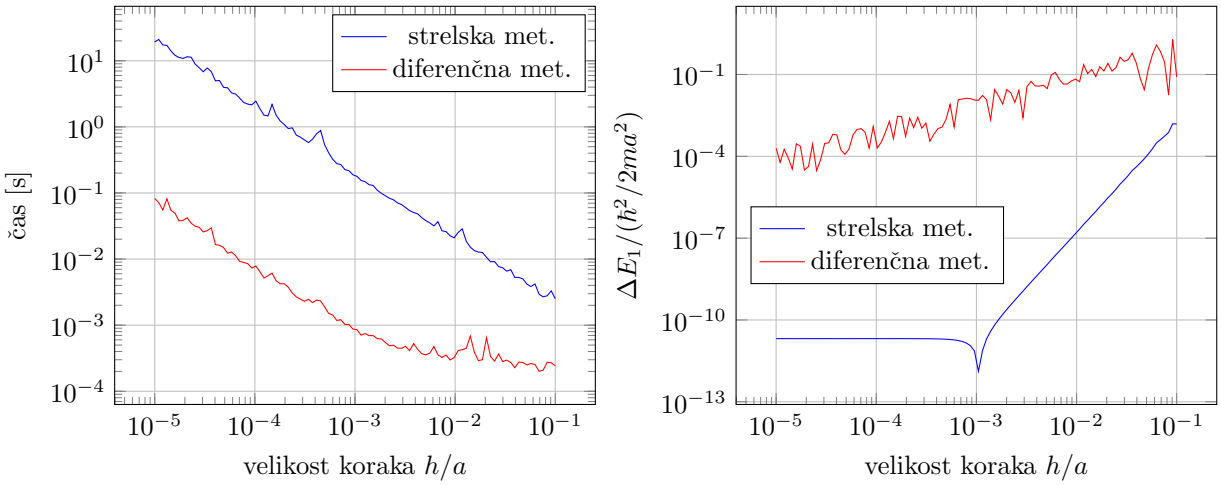


(a) Odvisnost vrednosti valovne funkcije na koncu jame od velikosti energije pri strelski metodi.

(b) Največje absolutno odstopanje prve lastne funkcije od analitične rešitve za različne velikosti koraka h/a.

Slika 3: Energije in odstopanja lastnih funkcij za neskončno potencialno jamo.

več pa ni za povedati. V isti sapi pa ne smemo pozabiti na Graf 4b, ki nam prikazuje odstopanje prve lastne energije od prave vrednosti. V tem primeru je strelska metoda v nepošteni prednosti, saj je pri njej natančnost energije omejena z natančnostjo sekantne metode, ki je v tem primeru 10^{-10}. Vseeno pa je natančnost diferenčne metode z manjšanjem zrnatosti mreže pada zelo počasi. Pri koraku $h/a = 10^{-5}$ je odstopanje energije velikanskih 10^{-4}. Na Grafu 3b je prikazano še odstopanje lastne funkcije od analitične rešitve (po postopku primerjanja, ki je opisan v prejšnjem odstavku). Natančnost strelske metode se z manjšanjem koraka izboljšuje, dokler ne doseže natančnosti sekantne metode. Pri diferenčni metodi pa je situacija zelo nenavadna. Z manjšanjem koraka se nenatančnost *veča*. Najverjetneje je za to odgovorna kakšna neodkrita napaka v moji kodi.



(a) Čas izvajanja obeh metod za različne velikosti koraka h/a.

(b) Odstopanje od prave energije za obe metodi v odvisnosti od velikosti koraka h/a.

Slika 4: Primerjava strelske in diferenčne metode za neskončno potencialno jamo. Vse meritve so bile izvedene za prvo lastno funkcijo.

3 Končna potencialna jama

Preden začnemo numerično reševanje, si poglejmo analitične rešitve za končno potencialno jamo. Tokrat rešujemo diferencialno enačbo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi = E\psi,$$

kjer je

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{za } |x| < a/2; \\ V_0 & \text{za } |x| > a/2. \end{cases}$$

Osredotočili se bomo samo na vezana stanja, torej $E < V_0$. Pri večjih energijah je spekter zvezen, hkrati pa delec sploh ni omejen na jamo. Za vezana stanja je sta robna pogoja $\psi(\infty) = \psi(-\infty) = 0$. Preden pa se enačbe lotimo matematično, se splača narediti eno fizikalno opazko: potencial je simetričen, torej se bodo lastne funkcije ločile na sode in lihe. Vpeljemo dve novi spremenljivki:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad \kappa = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}.$$

V jami je rešitev enaka:

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx),$$

zunaj jame pa:

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}.$$

Vzemimo sodo lastno funkcijo ψ_s. Velja $\psi_s(x) = \psi_s(-x)$, zato se lahko osredotočimo samo na pozitivne x. Zaradi sodosti velja $A = 0$, zaradi robnega pogoja pa $C = 0$. Podobno velja za lihe lastne funkcije ψ_l, le da je tokrat $B = 0$:

$$\psi_s(x) = \begin{cases} B\cos(kx) & \text{za } 0 \le x < a/2; \\ De^{-\kappa x} & \text{za } x > a/2; \\ \psi_s(-x) & \text{za } x < 0, \end{cases} \qquad \psi_l(x) = \begin{cases} A\sin(kx) & \text{za } 0 \le x < a/2; \\ De^{-\kappa x} & \text{za } x > a/2; \\ -\psi_l(-x) & \text{za } x < 0. \end{cases}$$

Pri spoju obeh delov funkcij pa morata biti enaki vrednosti in odvoda. V sodem primeru imamo:

$$B\cos(ka/2) = De^{-\kappa a/2}, \quad -kB\sin(ka/2) = -\kappa De^{-\kappa a/2}.$$

Če drugi pogoj delimo s prvim, dobimo:

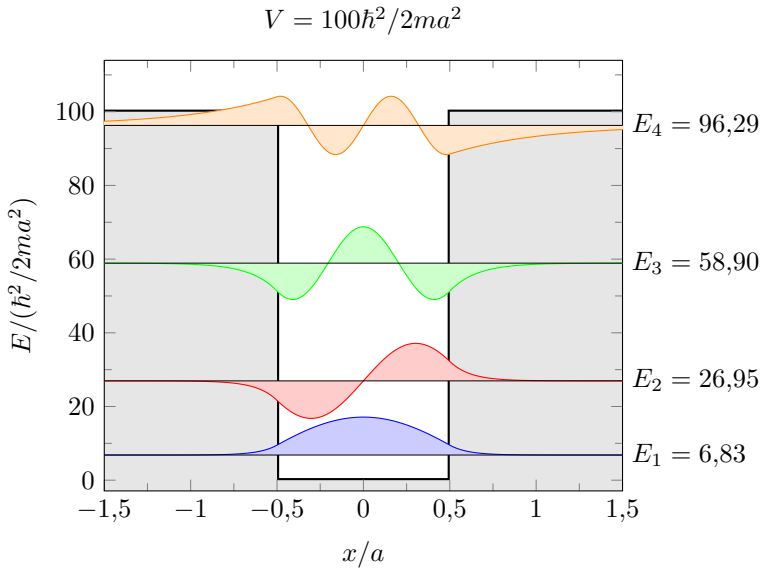
$$k\tan(ka/2) = \kappa.$$

Vpeljemo novo spremenljivko $z_s = ka/2$ in $z_0 = a\sqrt{2mV_0}/(2\hbar)$. Podobno storimo pri lihih funkcijah in dobimo dve implicitni enačbi:

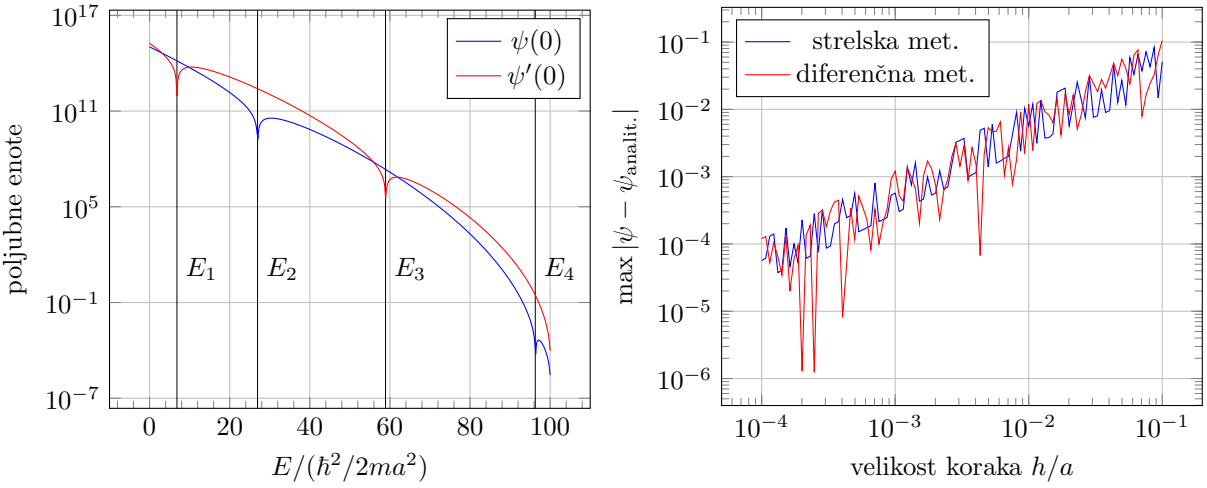
$$\tan(z_s) = \sqrt{\left(\frac{z_0}{z_s}\right)^2 - 1}, \quad \cot(z_l) = -\sqrt{\left(\frac{z_0}{z_l}\right)^2 - 1}.$$

Rešitve teh dveh enačb nam dajo dovoljene vrednosti k in posledično tudi E. Obe konstanti A in D dobimo s pomočjo zveznosti na robu jame in normalizacije. Analitičen izraz obstaja, vendar je skrajno nepraktičen, zato ga ne podajam. Vsa štiri vezana lastna stanja v potencialu $V_0 = 100\hbar^2/2ma^2$ in njihove pripadajoča energije so prikazana na Sliki 5.

Diferenčna metoda v tem primeru ni bila nič bolj zahtevna kot pri neskončni jami, le dodati smo morali funkcijo potenciala v diagonalo matrike. Strelska metoda pa se je nepričakovano zapletla. V tem delu bom preskočil vse neuspele poskuse in bom raje razložil tistega, ki je deloval. Streljal sem z $x = -5a$ proti $x = 0$ in lovil bodisi $\psi(0) = 0$ bodisi $\psi'(x) = 0$ (sode ali lihe funkcije). Za začetni pogoj sem vzel $\psi'(-5a) = 0$, čeprav je tudi možnost $\psi(-5a) = 0$ delovala. Zelo pomembno je bilo da sem preostalo vrednost začetnega pogoja nastavil dovolj majhno, da vrednost v bližini roba jame ni presegla 10^{128}. Preostali del metode je enak kot pri neskončni jami. Vrednosti valovne funkcije in njenega odvoda v sredini jame pri različnih energijah so prikazane na Sliki 6a. Zaradi zelo velikih razlik (preko dvajset redov velikosti), je prikazan



Slika 5: Vezane lastne funkcije končne potencialne jame globine $V_0 = 100\hbar^2/2ma^2$.



(a) Odvisnost vrednosti valovne funkcije in njenega odvoda na sredini jame od velikosti energije pri strelski metodi. Streljanje s točke $x = -5a$ proti sredini jame.

(b) Največje absolutno odstopanje prve lastne funkcije od analitične rešitve za različne velikosti koraka h/a.

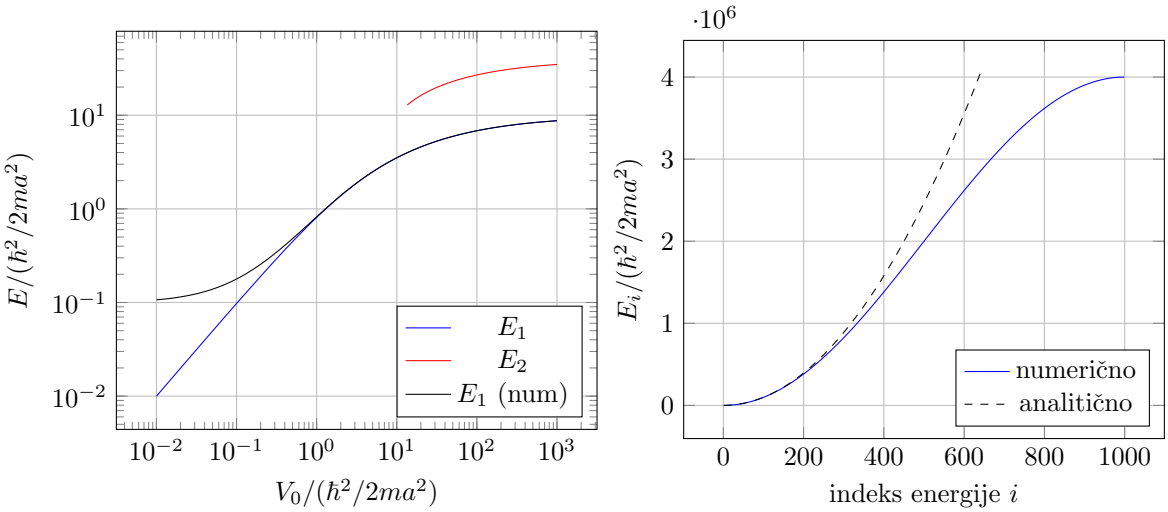
Slika 6: Energije in odstopanja lastnih funkcij za neskončno potencialno jamo. Globina jame je $V_0 = 100\hbar^2/2ma^2$.

logaritem absolutne vrednosti. Energije, kjer je vrednost funkcije nič, ustrezajo lihim lastnim stanjem, kjer pa je vrednost odvoda nič, pa sodim lastnim stanjem.

Tudi za končno jamo sem naredil vse iste primerjave med metodama, kot pri neskončni jami. V splošnem nisem odkril veliko novega, le graf odstopanja lastne funkcije je sedaj bistveno bolj smiseln (Slika 6b). Opaziti je, da se obe metodi zelo podobno izboljšujeta z manjšanjem koraka.

Za konec rednega dela pa lahko rečemo še kakšno besedo o lastnih energijah. Prednost diferenčne metode je tudi v tem, da hkrati vrne zelo veliko lastnih funkcij in energij. Vendar pa niso vse pravilne. Poglejmo si primer matrike velikosti 1000×1000 za neskončno potencialno jamo. Energije bi morale biti sorazmerne z kvadratom indeksa (črtkana črta na grafu 7b), kar velja do približno $i = 200$, potem pa se začnejo energije odmikati od te krivulje. Zaradi posebne simetričnosti Hamiltonove matrike (simetrična je tudi okoli antidiagonale), morajo biti tudi lastne vrednosti simetrične okoli $i = 500$. To se tudi zgodi (Graf 7b), zato pa višje energije niso več tako natančne.

Opazujemo lahko tudi spreminjanje prve lastne energije z globino končnega potenciala. Pričakujemo lahko dve asimptotski obnašanji. Pri $V_0 \gg \hbar^2/2ma^2$ mora biti lastna energija zelo podobna tisti v neskončni jami ($E_1 = h^2/8ma^2$), pri $V_0 \ll \hbar^2/2ma^2$ pa pričakujemo samo eno vezano stanje, ki bo zelo blizu robu jame ($E_1 = V_0$). To je natanko tisto, kar zares opazimo na Grafu 7a. Pri velikih V_0 se krivulja uravna, pri majhnih pa se izravna pod kotom 45°. Pri $V_0 = \pi^2\hbar^2/2ma^2$ dobimo še drugo vezano stanje, ki ga predstavlja rdeča črta. Za numerično rešitev sem uporabil diferenčno metodo na intervalu $[-5a, 5a]$ z zrnastostjo $h/a = 10^{-5}$. Z analitično rešitvijo se ujema nekje do $V \approx 1$, pri manjših globinah pa se začne odmikati. To je posledica dolžine interval $[-5a, 5a]$, na robu katerega pri diferenčni metodi postavim odvod funkcije na nič. Pri manjših vrednostih V ima valovna funkcija tako dolge in debele repe, da do roba intervala ne pade zadosti. Števila, ki jih smatram za "analitična", sem dobil z reševanjem implicitne enačbe za z_0 s pomočjo Newtonove metode, zato njihova natančnost v našem kontekstu ni vprašljiva.



(a) Prvi dve lastni vrednosti v odvisnosti od globine jame V_0. S črno je označena prva energija, pridobljena z diferenčno metodo na intervalu $[-5a, 5a]$.

(b) Najnižje lastne energije v neskončni potencialni jami. V modrem so prikazane lastne vrednosti matrike pri diferenčni metodi.

Slika 7: Nekaj raziskovanja o energijah.

4 Dodatna naloga

Dodatna naloga sprašuje po rešitvi enačbe

$$\frac{\mathrm{d}^4\psi}{\mathrm{d}x^4} - \lambda\psi = 0,$$

pri robnih pogojih $\psi(-a/2) = \psi''(a/2) = \psi(-a/2) = \psi''(-a/2) = 0$. Tudi ta primer je analitično rešjiv. Karakteristični polinom je $z^4 - \lambda = 0$. Enako kot pri neskončni potencialni jami se raje prestavimo na interval $[0, a]$. Če označimo $\lambda = k^4$, so rešitve enačbe $z = \pm k$ in $z = \pm ik$. Splošna rešitev je torej:

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) + C\cosh(kx) + D\sinh(kx).$$

Prvi začetni pogoj ($\psi(0) = 0$) dá $A = -C$, drugi ($\psi''(0) = 0$) pa $A = C$. Sledi $A = C = 0$. Tretji pogoj ($\psi(a) = 0$) zahteva

$$A\sin(ka) + C\sinh(ka) = 0,$$

četrti pogoj ($\psi''(a) = 0$) pa

$$-A\sin(ka) + C\sinh(ka) = 0.$$

Dobimo $C = 0$ in $\sin(ka) = 0$, kar so torej identične rešitve, kot pri neskončni potencialni jami. Lastne vrednosti so $\lambda_n = (\pi n/a)^4$ in lastne funkcije

$$\psi_n(x) = \sin(\pi n x/a).$$

Matrika, ki ji iščemo lastne vrednosti, je petdiagonalna, z diagonalami 1, -4, 6, -4 in 1. Razmislimo, kako moramo v tem primeru upoštevati robne pogoje. Naj bodo vrednosti $x_0, x_1, ..., x_n$ enakomerno porazdeljene na intervalu $[-a/2, a/2]$, kjer je $x_0 = -a/2$ in $x_n = a/2$. Velja $\psi(x_0) = 0$ in $\psi(x_n) = 0$, zato Hamiltonova matrika potrebuje biti le dimenzije $(n-1) \times (n-1)$. Kako pa dobimo vrednost $\psi(x_1)$? Po formuli velja

$$h^4\psi(x_1) = \psi(x_{-1}) - 4\psi(x_0) + 6\psi(x_1) - 4\psi(x_2) + \psi(x_3).$$

Težave nastanejo, ker ne vemo, koliko je $\psi(x_{-1})$. Da bo metoda natančna, želimo $\psi(x_{-1})$ aproksimirati vsaj do reda h^2. Velja:

$$\psi(x_{-1}) = \psi(x_0) - h\psi'(x_0) + \frac{h^2}{2}\psi''(x_0) + \mathcal{O}(h^3).$$

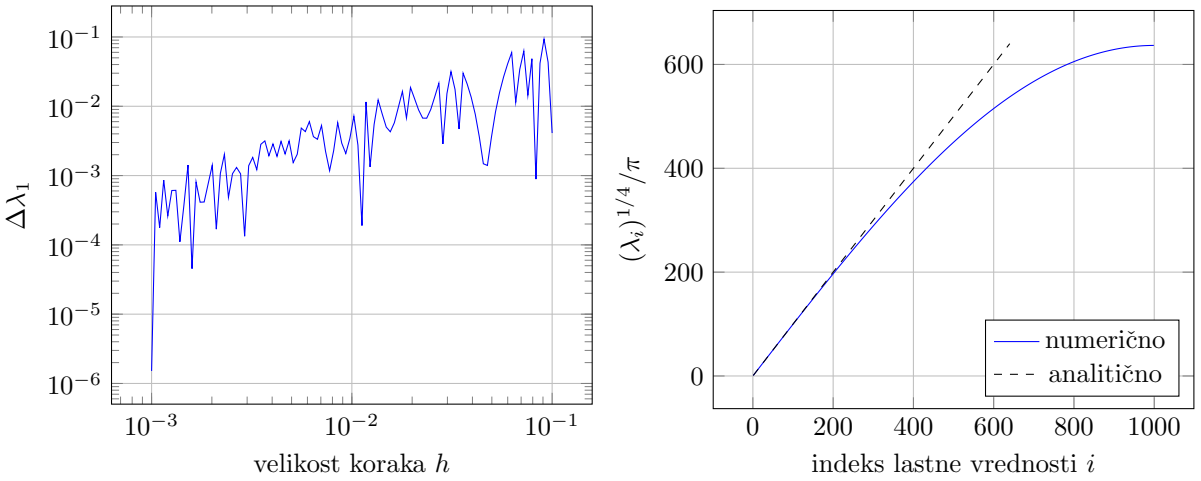
Na srečo je $\psi(x_0) = \psi''(x_0) = 0$, torej moramo izračunati le prvi dovod. Velja $\psi'(x_0) = (\psi(x_1) - \psi(x_{-1}))/2h$, torej $\psi(x_{-1}) = -(\psi(x_1) - \psi(x_{-1}))/2$ oziroma $\psi(x_{-1}) = -\psi(x_1)$. Vstavimo v prejšnjo enačbo in dobimo:

$$h^4\psi(x_1) = -\psi(x_1) + 4 \cdot 0 + 6\psi(x_1) - 4\psi(x_2) + \psi(x_3) = 5\psi(x_1) - 4\psi(x_2) + \psi(x_3).$$

Enake argumente lahko naredimo za končni robni pogoj. Hamiltonova matrika je torej:

$$H = \begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -4 & 6 & -4 & 1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 6 & -4 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 6 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 6 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -4 & 6 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -4 & 6 & -4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & -4 & 5 \end{bmatrix}.$$

Ker je situacija praktično identična, kot pri prvem delu, lastnih funkcij ne bom še enkrat risal, lahko pa potrdim, da se rezultati diferenčne metode ujemajo z analitičnimi. Pogledamo si lahko, kako se spreminja odstopanje prve lastne vrednosti od analitične rešitve z manjšanjem koraka (Slika 8a). Na žalost v tem primeru nisem mogel uporabiti metode `eigh_tridiagonal`, zato sem natančnost lahko preveril samo do $h = 1/1000$.



(a) Odstopanje prve lastne vrednosti od analitične rešitve v odvisnosti od velikosti koraka h.

(b) Prvih nekaj lastnih vrednosti. V modrem so prikazane lastne vrednosti matrike pri diferenčni metodi na mreži velikosti 1000 ($h = 1/1000$).

Slika 8: Lastne vrednosti pri dodatni nalogi.

Enako kot na sliki 7b lahko opazujemo tudi spreminjanje lastnih vrednosti z njihovim indeksom. Tokrat sem jih že primerno transformiral, torej korenil in delil s π. Rezultati so prikazani na Sliki 8b. Vsi zaključki so identični kot pri Sliki 7b, le da simetričnost zaradi transformacije ni več razvidna.

5 Še nekaj dodatnega raziskovanja

Čisto na koncu sem se poglobil v posebej zanimivo vrsto analitično rešljivega potenciala. Večino informacij sem pridobil iz Naloge 2.48 v [1] in [2]. Naj ima potencial obliko:

$$V(x) = -\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2ma^2}\operatorname{sech}^2(x/a),$$

kjer je l celo število, $\operatorname{sech}(x) = 1/\cosh(x)$ pa hiperbolični sekans. Ta potencial ima natanko l vezanih stanj. Osnovno stanje ima obliko:

$$\psi_l^{(0)} = \frac{1}{2^l}\sqrt{\frac{l(l+1)C_l}{a}}\operatorname{sech}^l(x/a),$$

kjer so $C_l = (2n)!/n!(n+1)!$ Catalanova števila. Do vseh ostalih stanj pridemo z uporabo lestvenega operatorja:

$$a_l = -ia\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - il\tanh(x/a).$$

Tako rekoč gre za hiperbolično različico kvantnega harmonskega oscilatorja. Na primer, prvo vzbujeno stanje za $l = 2$ je

$$\psi_2^{(2)}(x) \propto \tanh(x/a)/\cosh(x/a).$$

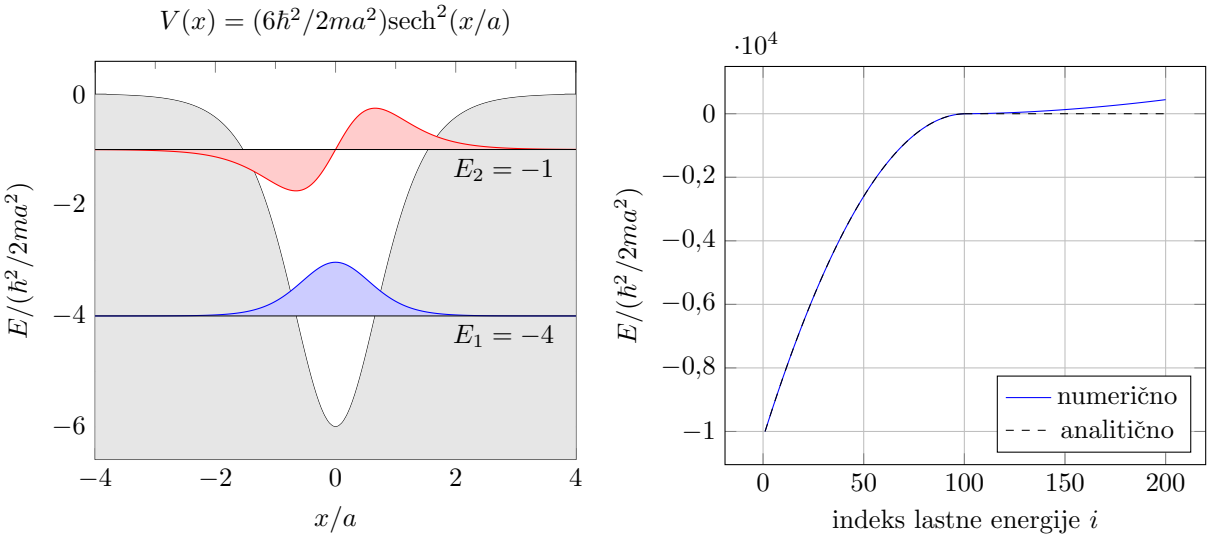
Energije so:

$$E_l^{(n)} = -(l-n)^2\frac{\hbar^2}{2ma^2},$$

kjer l označuje globino potenciala, (n) pa indeks lastne energije. Še bolj zanimiv pa je ta potencial za nevezana stanja. Izkaže se, da je transmisijski koeficient za to potencialno oviro enak:

$$T(E,l) = \exp\left(2i\sum_{n=1}^{l}\arctan\left(\frac{n\hbar}{2\sqrt{2mE}}\right)\right).$$

Z drugimi besedami, $|T| = 1$ in $R = 0$, torej gre za *brezodbojni* (angl. *reflectionless*) potencial.



(a) Prvi dve lastni funkciji potenciala $V \propto \operatorname{sech}^2(x)$.

(b) Prvih nekaj lastnih vrednosti obravnavanega potenciala za $l = 100$. V modrem so prikazane lastne vrednosti matrike pri diferenčni metodi na mreži velikosti $2 \cdot 10^5$.

Slika 9: Lastne vrednosti in lastne funkcije za potencial $V \propto \operatorname{sech}^2(x)$.

Nekaj teh teoretičnih napovedi sem preveril tudi računsko z diferenčno metodo. Na Sliki 9a vidimo prvi (in edini) dve vezani stanji za $l = 2$, ki se ujemata z napovedma. Na Sliki 9b pa so prikazane lastne vrednosti za $l = 100$. Uporabljena matrika je bila velikosti $2 \cdot 10^5$ in opazimo lahko res lepo ujemanje s teorijo do indeksa 100, ko velja kvadratični režim. Naprej so seveda naši robni pogoji nesmiselni, saj funkcija nikoli ne pade na nič. Za $E > 0$ bi bilo bolje uporabiti periodične robne pogoje. Vseeno pa je na izbranem intervalu $[-10a, 10a]$ še dosti takih stanj, ki imajo slučajno pri $x = \pm 10a$ ničlo, da se modra črta še nekaj časa po stotem indeksu ujema s črtkano črto.

6 Zaključek

Mislim, da nimam nič več pametnega za pripomniti. Brezodbojni potencial je bil tako zanimiv, da mi je vzel čisto preveč časa, zato ga tukaj ne mislim izgubljati še več.

Literatura

[1] David J. Griffiths (1995) *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, Inc. ISBN: 0-13-124405-1.

[2] R. L. Jaffe (2009) *An Algebraic Approach to Reflectionless Potentials in One Dimension*, Center for Theoretical Physics, 77 Massachusetts Ave., Cambridge, MA 02139-4307, `https://www.physics.smu.edu/scalise/P6335fa19/notes/ReflectionlessPotential.pdf`