## 10. naloga: Diferenčne metode za parcialne diferencialne enačbe

Enorazsežna nestacionarna Schrödingerjeva enačba

$$\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H\right)\psi(x,t) = 0\,, \qquad \psi(x,t_0) = \phi(x)$$

je osnovno orodje za nerelativistični opis časovnega razvoja kvantnih stanj v različnih potencialih. Tu obravnavamo samo od časa neodvisne hamiltonske operatorje

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Razvoj stanja $\psi(x,t)$ v stanje $\psi(x,t+\Delta t)$ opišemo s približkom

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

ki unitaren in je reda $\mathcal{O}(\Delta t^3)$. Časovni razvoj stanja spremljamo ob časih $t_n = t_0 + n\Delta t$ ($n = 0,1,\ldots,N_t$) na krajevni mreži $x_j = x_0 + j\Delta x$ ($j = 0,1,\ldots,N_x$). 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 osnovno enačbo, dobimo sistem enačb

$$\begin{aligned}\psi_j^{n+1} &- \frac{\mathrm{i}\hbar\Delta t}{4m\Delta x^2}\left[\psi_{j+1}^{n+1} - 2\psi_j^{n+1} + \psi_{j-1}^{n+1}\right] + \frac{\mathrm{i}\Delta t}{2\hbar}\,V_j\psi_j^{n+1} \\ &= \psi_j^n + \frac{\mathrm{i}\hbar\Delta t}{4m\Delta x^2}\left[\psi_{j+1}^n - 2\psi_j^n + \psi_{j-1}^n\right] - \frac{\mathrm{i}\Delta t}{2\hbar}\,V_j\psi_j^n\,, \qquad j = 1,2,\ldots,N_x-1\,,\end{aligned}$$

medtem ko postavimo $\psi_j^n = 0$ za $j < 0$ in $j > N_x$. Vrednosti valovne funkcije v točkah $x_j$ uredimo v vektor

$$\boldsymbol{\Psi}^n = \left(\psi_0^n, \psi_1^n, \ldots, \psi_{N_x}^n\right)^{\mathrm{T}}$$

in sistem prepišemo v matrično obliko

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Psi}^{n+1} = \boldsymbol{A}^*\boldsymbol{\Psi}^n\,, \qquad \boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} d_0 & a & & & & \\ a & d_1 & a & & & \\ & a & d_2 & a & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & a & d_{N_x-1} & a \\ & & & & a & d_{N_x} \end{pmatrix},$$

kjer je

$$b = \frac{\mathrm{i}\hbar\Delta t}{2m\Delta x^2}\,, \qquad a = -\frac{b}{2}\,, \qquad d_j = 1 + b + \frac{\mathrm{i}\Delta t}{2\hbar}\,V_j\,.$$

Dobili smo torej matrični sistem, ki ga moramo rešiti v vsakem časovnem koraku, da iz stanja $\boldsymbol{\Psi}^n$ dobimo stanje $\boldsymbol{\Psi}^{n+1}$. Matrika $\boldsymbol{A}$ in vektor $\boldsymbol{\Psi}$ imata kompleksne elemente, zato račun najlaže opraviš v kompleksni aritmetiki plavajoče vejice (`#include <complex>`).

*Naloga:* Spremljaj časovni razvoj začetnega stanja

$$\psi(x,0) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\,\mathrm{e}^{-\alpha^2(x-\lambda)^2/2}$$

v harmonskem potencialu $V(x) = \frac{1}{2}\,kx^2$, kjer je $\alpha = (mk/\hbar^2)^{1/4}$, $\omega = \sqrt{k/m}$. Analitična rešitev je koherentno stanje

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}\,\exp\left[-\frac{1}{2}\Big(\xi - \xi_\lambda\cos\omega t\Big)^2 - \mathrm{i}\left(\frac{\omega t}{2} + \xi\xi_\lambda\sin\omega t - \frac{1}{4}\,\xi_\lambda^2\sin 2\omega t\right)\right]\,,$$

kjer je $\xi = \alpha x$, $\xi_\lambda = \alpha\lambda$. Postavi $\hbar = m = 1$ in parametre $\omega = 0.2$, $\lambda = 10$. Krajevno mrežo vpni v interval $[x_0, x_{N_x}] = [-40, 40]$ z $N_x = 300$ podintervali. Nihajni čas v izbranih enotah je $T = 10\pi$. Stanje opazuj do časa $t = 10T$ in ustrezno prilagodi časovni korak $\Delta t$ (napravi nek kompromis med natančnostjo računa in časovno potratnostjo).

Opazuj še razvoj gaussovskega valovnega paketa

$$\psi(x,0) = (2\pi\sigma_0^2)^{-1/4}\mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0(x-\lambda)}\mathrm{e}^{-(x-\lambda)^2/(2\sigma_0)^2}$$

v prostoru brez potenciala ($V(x) = 0$). Postavi $\hbar = 1$, $m = 1/2$, $\sigma_0 = 1/20$, $k_0 = 50\pi$, $\lambda = 0.25$ in območje $[x_0, x_{N_x}] = [-0.5, 1.5]$ ter $\Delta t = 2\Delta x^2$. Časovni razvoj spremljaj, dokler težišče paketa ne pride do $x \approx 0.75$. Analitična rešitev je

$$\psi(x,t) = \frac{(2\pi\sigma_0^2)^{-1/4}}{\sqrt{1 + \mathrm{i}\hbar t/(2m\sigma_0^2)}}\,\exp\left[\frac{-(x-\lambda)^2/(2\sigma_0)^2 + \mathrm{i}k_0(x-\lambda) - \mathrm{i}\hbar k_0^2 t/(2m)}{1 + \mathrm{i}\hbar t/(2m\sigma_0^2)}\right]\,.$$

*Dodatna naloga:* Z uporabljenim približkom za drugi odvod reda $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ dobimo tridiagonalno matriko. Z diferencami višjih redov dobimo večdiagonalno (pasasto) matriko, a dosežemo tudi večjo krajevno natančnost. Diference višjih redov lahko hitro izračunaš 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 diference (odvoda), `n` je število intervalov dolžine $h = \Delta x$, ki jih upošteva diferenca, in `s` število intervalov med točko, kjer diferenco računamo, in levim robom "šablone". Koeficiente druge diference dobimo na primer takole: `FD[2, 2, 1]`.

Tudi korakanje v času je mogoče izboljšati z uporabo Padéjeve aproksimacije za eksponentno funkcijo, glej [1]. (To je "dodatna dodatna" naloga.)

## Literatura

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