



Modelska Analiza 2

3. naloga - Lastne energije Schrödingerjeve enačbe

Avtor: Matic Lubej
Asistent: dr. Simon Čopar
Predavatelj: prof. dr. Alojz Kodre

Ljubljana, 12.3.2014

Naloga:

Pri tej nalogi smo se spoznali s Schrödingerjevo enačbo in načinom za reševanje te enačbe. Uporabil sem metodo Numerova z uporabo začetnega razvoja funkcije. Metoda se je izkazala za zelo natančno, preko nje pa smo lahko določili tudi lastne vrednosti in lastne funkcije problema. V prvem delu naloge smo iskali vezavne energije vodikovega atoma in ustrezne valovne funkcije za različne vrednosti vrtilne količine, v drugem delu naloge pa smo reševali model propagacije monokromatske svetlobe v snovi in iskali disperzijsko relacijo.

Del I

Lastne energije vodikovega atoma

1 Naloga

Razišči najugodnejši postopek za reševanje radialnega dela Schrödingerjeve enačbe s Coulombskim potencialom. Uporabiš lahko metodo Runge-Kutta, še boljša pa je metoda Numerova, ki jo priporočajo za ta tip problemov in je za red boljša od RK4. Natančnost metod lahko preveriš s točnimi lastnimi funkcijami.

2 Reševanje

Za vodikov atom ima enačba obliko:

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

če je $\Psi(x) = R(x)/x$, $x = r/a$, $e = E/E_0$, a je Bohrov radij in $E_0 = 13.6$ eV. Za reševanje sem uporabil 2 različna postopke, ki sta:

- Metoda Numerova z uporabo prej definiranih 2 točk
- Metoda Numerova z uporabo prej definiranih 3 točk

Natančnosti različnih metod sem tudi primerjal med sabo.

Pri metodi Numerova enačbo

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2(x) \right] y(x) = 0 \quad (2)$$

zapišemo kot

$$\left(1 + \frac{h^2}{12} k_{i+1}^2 \right) y_{i+1} - 2 \left(1 - \frac{5h^2}{12} k_i^2 \right) y_i + \left(1 + \frac{h^2}{12} k_{i-1}^2 \right) y_{i-1} = 0 + \mathcal{O}(h^6). \quad (3)$$

Reševal sem v programu Matlab, ki se je v tem primeru izkazal za veliko hitrejšega od Mathematice. Podatke sem nato vseeno predstavil s pomočjo Mathematice. Širino koraka sem v vseh primerih imel fiksno $h = 5 \times 10^{-4}$, dolžino pa sem spreminjal glede na obliko funkcije, oziroma glede na natančnost pogoja $R(\infty) = 0$. V prvem primeru metode Numerova sem potreboval $y(h) = C$, kjer je C poljubna konstanta, ki pade stran pri normalizaciji, v drugem primeru metode Numerova pa sem uporabil razvoj funkcije $y(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots$ za določitev dodatne točke $y(2h)$, kjer sem nato pri integraciji uporabil točki $y(h)$ in $y(2h)$. Uporabljeni koeficienti za $l = 0$ se glasijo

$$a_0 = 0, \quad a_1 = C = 1, \quad a_2 = -1, \quad a_3 = \frac{1}{6}(2 - e), \quad a_4 = \frac{1}{18}(-1 + 2e), \quad a_5 = \frac{1}{360}(2 - 10e + 3e^2). \quad (4)$$

Za $l = 1$ so bili ti koeficienti

$$a_0 = a_1 = 0, \quad a_2 = C = 1, \quad a_3 = -\frac{1}{2}, \quad a_4 = \frac{1}{10}(1 - e), \quad a_5 = \frac{1}{180}(-2 + 7e), \quad (5)$$

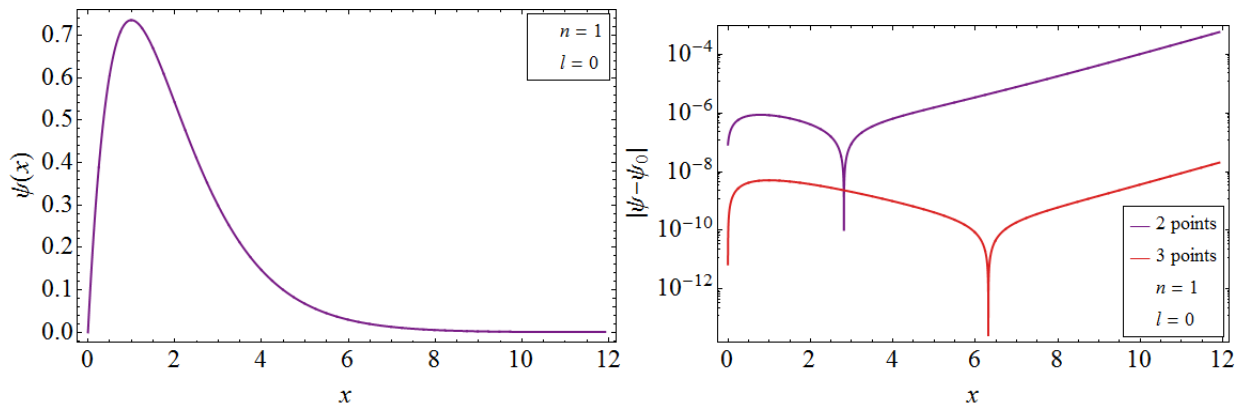
za $l = 2$ pa

$$a_0 = a_1 = a_2 = 0, \quad a_3 = C = 1, \quad a_4 = -\frac{1}{3}, \quad a_5 = \frac{1}{42}(2 - 3e), \quad a_6 = \frac{1}{252}(-1 + 5e). \quad (6)$$

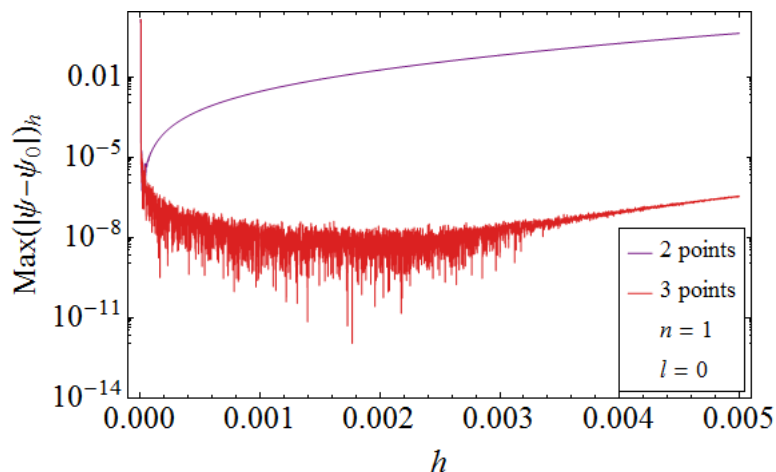
Lastne energije sistema sem poiskal z metodo bisekcije, kjer sem okolico vsake ničle na drobno prečesal. Opazil sem, da se težišče funkcije povečuje z energijo, zato sem lastne funkcije iskal na tak način, da metoda sama oceni, če funkcija divergira, oziroma, do kje naj se vzame območje $[0, L]$, če funkcija konvergira proti 0.

3 Rezultati

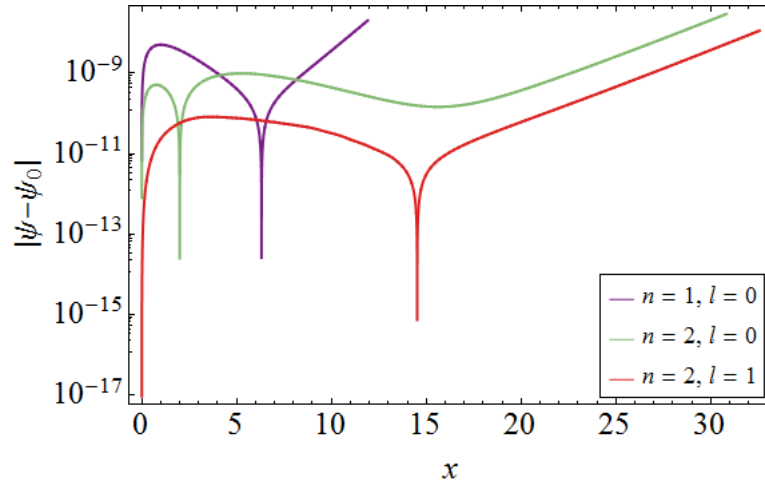
Preden sem se lotil iskanja „neznanih“ lastnih energij, sem se omejil na prvo lastno energijo $e = -1$ ter si ogledal natančnosti obeh metod. Oglejmo si najprje primerjavo rešitev obeh metod za kvantna števila $n = 1, l = 0$:



Na levi sliki vidimo obliko obravnavane funkcije, na desni pa natančnost izračunane funkcije po obeh metodah v primerjavi s točno rešitvijo $R_{10}(x) = 2xe^{-x}$. Vidimo, da je druga metoda v povprečju vsaj za dva reda velikosti natančnejša od prve. Vidimo, da se splača uporabiti razvoj funkcije za določitev prvih par točk pri metodi numerova. Tu se pojavi vprašanje, če je to res za poljubeno širino koraka h , zato sem preveril to tako, da sem si ogledal maksimalno napako na intervalu v odvisnosti od širine koraka h . Oglejmo si omenjeno primerjavo:

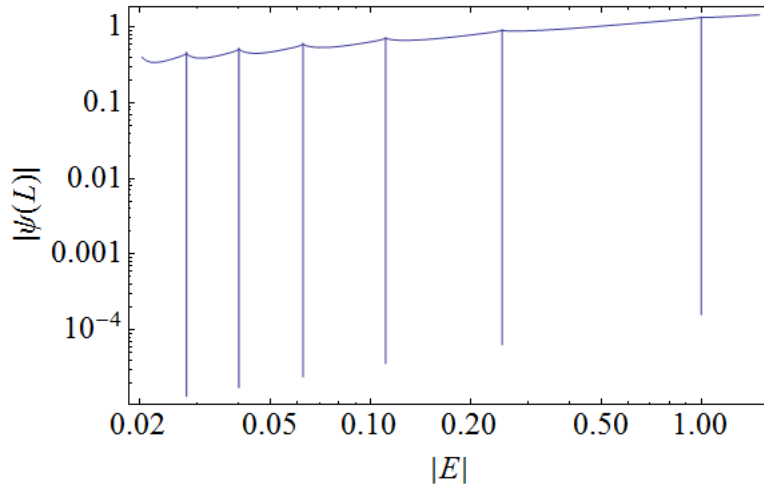


Vidimo, da je res druga metoda za poljuben h boljša od prve. Čudne stvari se zgodijo pri majhnih vrednostih koraka, vendar verjetno to pride na račun kratke dolžine intervala, ki je posledica majhnega koraka. Vidimo, da lahko brez skrbi računamo z drugo metodo. Žal sem natančnost metod preveril šele na koncu in sem tako vztrajal z uporabo časovnega koraka $h = 5 \times 10^{-4}$, medtem ko zdaj vidimo, da bi lahko z lahkoto vzel korak $h = 5 \times 10^{-3}$ s še vedno povsem zadovoljivo natančnostjo. Temu primerno si oglejmo še primerjave funkcij za višje vrednosti kvantnih števil. Spodnja slika prikazuje natančnosti rešitev $R_{10}(x)$, $R_{20}(x)$ in $R_{21}(x)$:

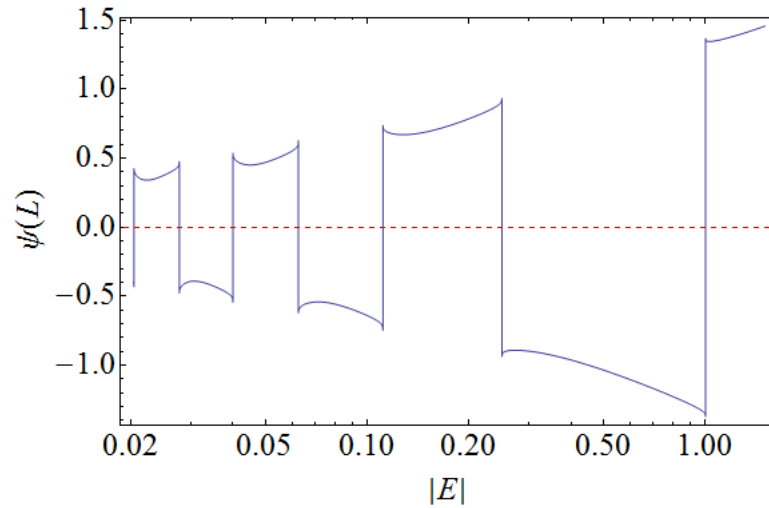


Vidimo, da imamo precej natnačne rešitve.

Sedaj, ko smo preverili natančnost metode, se lotimo iskanja lastnih energije sistema. Tega sem se lotil na dva načina. Prvi način je bil gledanje absolutne vrednosti amplitude pri neki končni dolžini. Ta način se ni izkazal za tako dobrega, saj so „odprta okna“ okoli lastnih rešitev zelo majhna, zato sem moral območje prečesati zelo nadrobno, da je bilo kaj opaziti. Ker je bilo takšno delo preveč zahtevno in časovno potratno, sem malo pogoljufal in vnaprej povedal, kdaj mora metoda na drobno prečesati območje. Spodaj je viden končni rezultat tega pristopa:



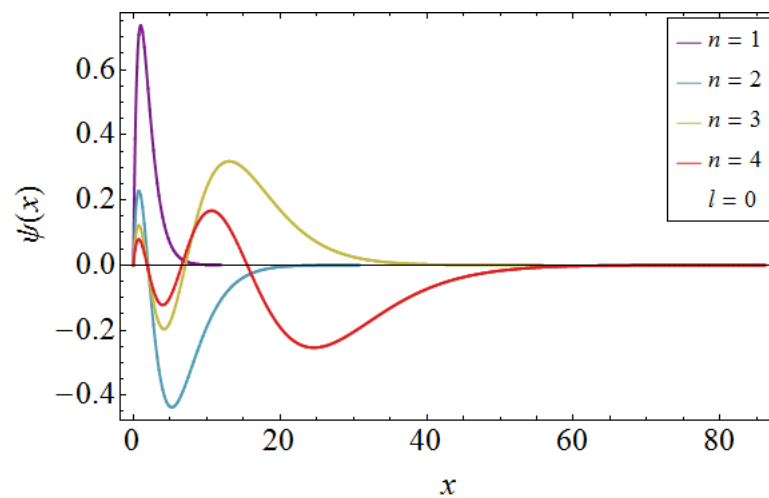
Rezultat je prikazan v log-log skali, kjer sem zaradi logaritemske skale x osi vrednosti energij pomnožil z (-1) . Res se lahko prepričamo, da je širina „špic“ premajhna, da bi lahko prej opazili kaj zanimivega, okolica teh točk pa tudi ne pove nič pametnega. Bolj se nam splača uporabiti dejstvo, da valovna funkcija spremeni predznak divergence, ko z energijo prečkamo lastno vrednost. V tem primeru lahko z bisekcijo poiščemo vse ničle na veliko bolj učinkovit način, saj metoda sama najde območje prehoda. Oglejmo si še končni rezultat tega pristopa:

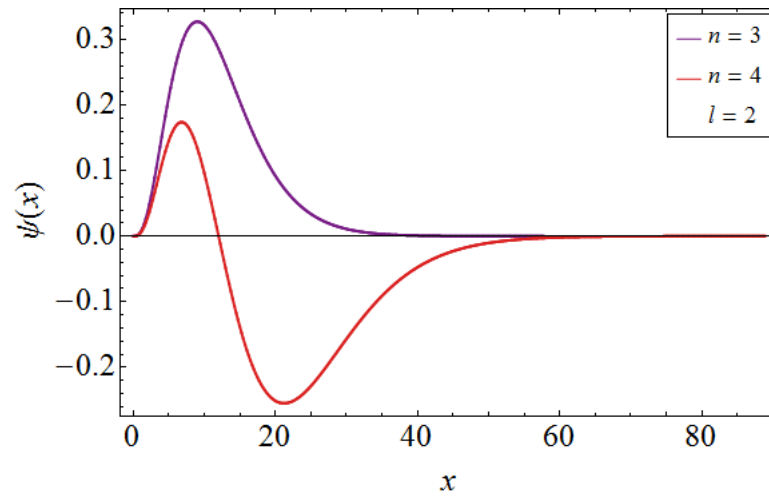
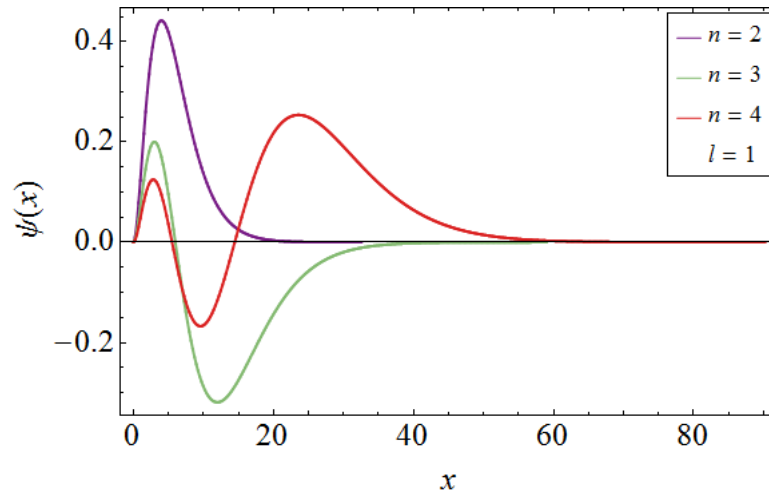


Vidimo, da skoki v negativno zelo lepo nakazujejo območje lastnih vrednosti energij, ki so enake $e = -\frac{1}{n^2}$. Spodaj je prikazana tabela točnih in izračunanih nekaj prvih lastnih vrednosti ter njihove natančnosti:

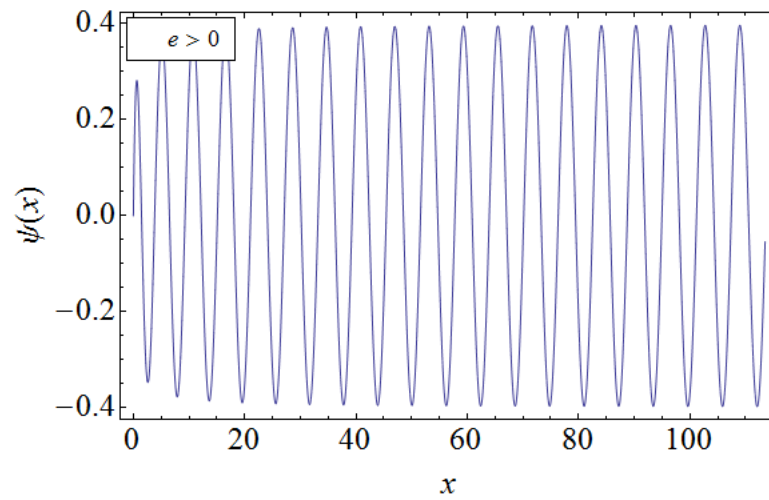
e_0	e	$\log_{10} e - e_0 $
-1	-0.999975	-4.60206
-0.25	-0.249974	-4.57675
-0.111	-0.111109	-5.68197
-0.0625	-0.0624994	-6.19382
-0.04	-0.0399991	-6.0688
-0.0277	-0.027777	-6.10265
-0.0204082...	-0.0204079	-6.60191

Sedaj, ko imamo lastne energije izračunane, si oglejmo par primerov lastnih funkcij. Spodaj so prikazane valovne funkcije za $l = 0, 1, 2$ in za ustrezne vrednosti n od 1 do 4:





Vidimo, da res vse funkcije končajo kot $R(\infty) = 0$. Kot zanimivost še omenimo, da za stanja z $e > 0$ dobimo ravne valove, torej nevezana stanja, ki imajo obliko, ki jo prikazuje naslednja slika:



Del II

Propagacija svetlobe

1 Naloga

Obravnavaj propagacijo monokromatske svetlobe v snovi, ki ima prostorsko odvisen lomni količnik. Pri iskanju lastnih načinov valovanja v svetlobnih vlaknih uporabi nastavek $\Psi(x) = (R(x)/\sqrt{x}) e^{i\lambda z}$. Uporabi profil lomnega količnika

$$n(x) = \begin{cases} 2 - \frac{1}{2}x^2 & x \leq 1 \\ 1 & x \geq 1 \end{cases}. \quad (7)$$

Izračunaj disperzijsko relacijo $\lambda(k)$ za $0.8 < k < 10$ in ugotovi, pri katerih valovnih številih k obstaja samo eno vezano stanje (t.i. *single mode fiber*).

2 Reševanje

Za propagacijo monokromatske svetlobe v snovi velja Helmholtzova enačba, ki se v brezdimenzijski obliki glasi

$$(\nabla^2 + n(\mathbf{r})^2 k^2) \Psi(\mathbf{r}) = 0. \quad (8)$$

Z uporabo nastavka dobimo enačbo za radialno simetrična stanja

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

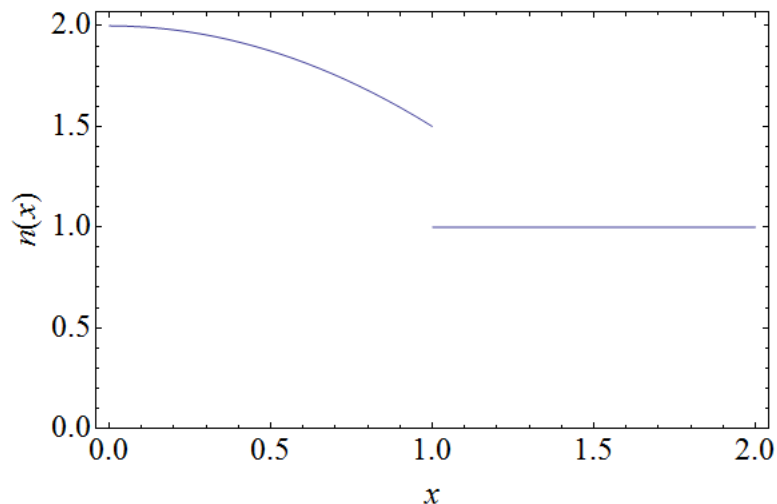
Tudi v tem primeru sem reševal z metodo numerova, kjer sem uporabil 2 vnaprej definirani točki, kar se je v prejšnjem primeru izkazalo kot bolj natančna izbira. Reševal sem v Matlabu s širino koraka $h = 5 \times 10^{-4}$. V prejšnjem primeru smo imeli en prost parameter, energijo, v tem primeru pa imamo prosta parametra 2, brezdimenzijsko valovno število k in pa lastno vrednost λ . Navodilo naloge nam podaja omejitev valovnega števila k na interval $k \in [0.8, 10]$. Po navodilu naloge sklepam, da je takšnih λ več in da se spreminjajo z valovnim številom k , saj sem moral tudi izračunati disperzijsko relacijo $\lambda(k)$. V tem delu naloge sem za začetni približek spet vzel razvoj funkcije. Začetni nastavek je imel obliko $y(x) = x^{1/2} (a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots)$, $n(x)$ pa je v okolici $x \ll 1$ kar enak $n(x) = 2 - \frac{1}{2}x$. Uporabljeni so bili naslednji koeficienti

$$a_1 = a_3 = \dots = a_{2n+1} = 0, \quad a_0 = C = 1, \quad a_2 = \frac{1}{4}(\lambda^2 - 4k^2), \quad a_4 = \frac{1}{64}(8k^2 + 16k^4 - 8k^2\lambda^2 + \lambda^4). \quad (10)$$

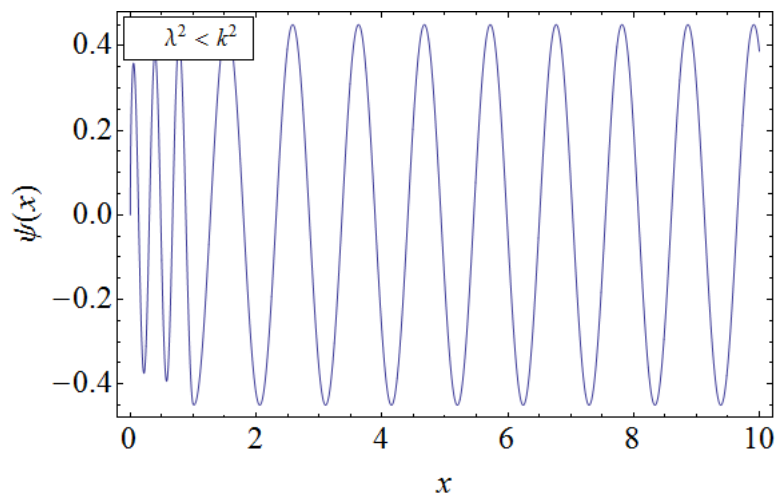
Reševanja sem se lotil tako, da sem si izbral fiksno vrednost k in prečesal območje λ ter poiskal takšne vrednosti, za katere se rešitev sklada s pogojem $R(\infty) = 0$.

3 Rezultati

Pri tej nalogi natančnosti ni bilo možno preveriti saj nam ni bilo danih točnih rešitev, zato sem se kar lotil reševanja z uporabo druge metode, ki se je v prvem delu naloge izkala za boljšo izbiro. Za začetek si lahko ogledamo profil lomnega količnika:

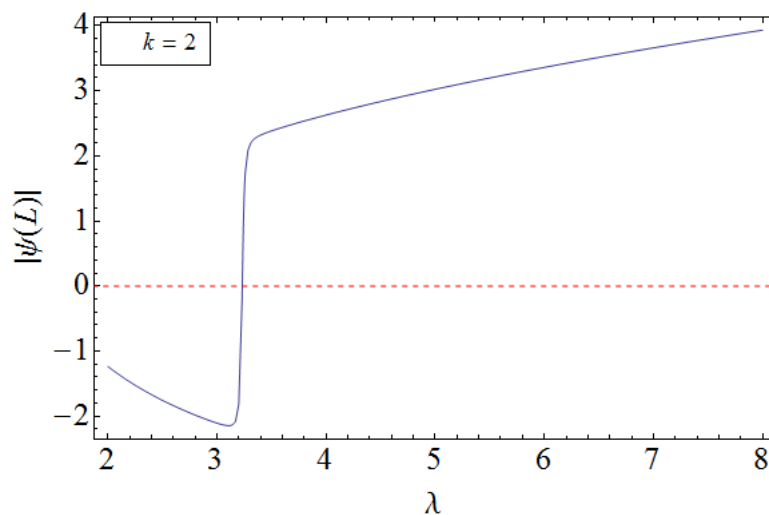


Izkaže se, da je širina intervala, na katerem leži funkcija, v povprečju večja od 1, torej je $\overline{n(x)} = 1$. Zaradi te relacije mora v splošnem veljati, da je $k^2 - \lambda^2 < 0$, da dobimo vezano stanje. V nasprotnem primeru spet dobimo za rešitev ravni val, kot je prikazano na spodnji sliki:

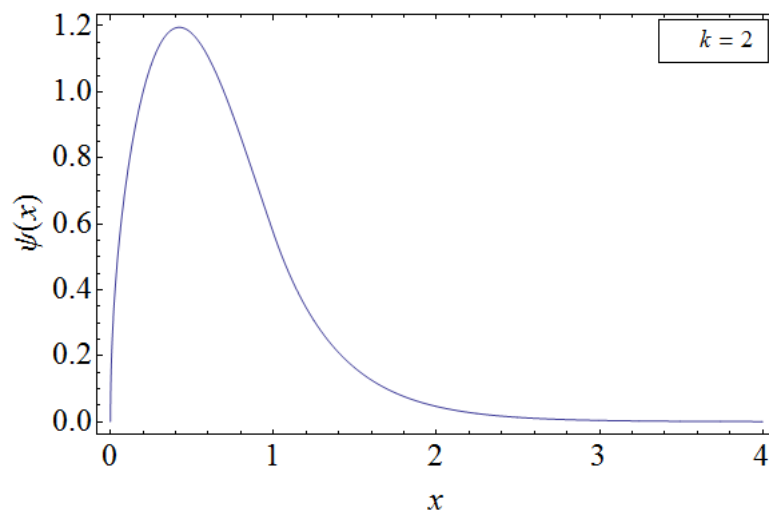


Vidimo, da so rešitve v tem primeru res periodične in se raztezajo čez območje snovi, torej $x > 1$,

Najprej sem se lotil iskanja lastnih vrednosti λ za nekaj fiksnih vrednosti parametra k . Spodaj je prikazano iskanje lastnih vrednosti za $k = 2$:

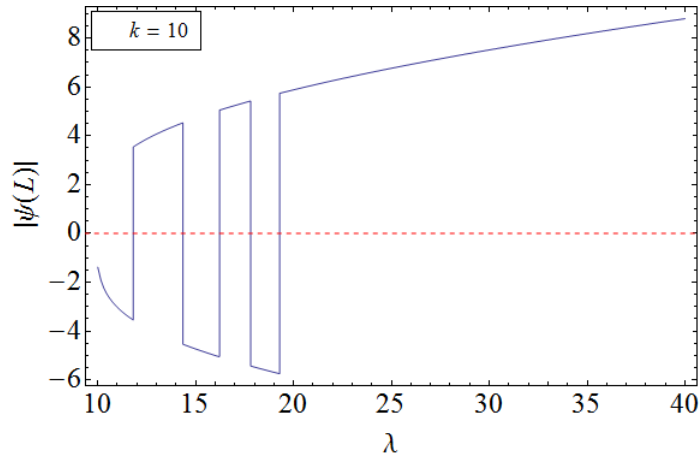


V tem primeru imamo samo eno lastno vrednost, saj imamo tudi le en prehod. Oglejmo si obliko te lastne funkcije:

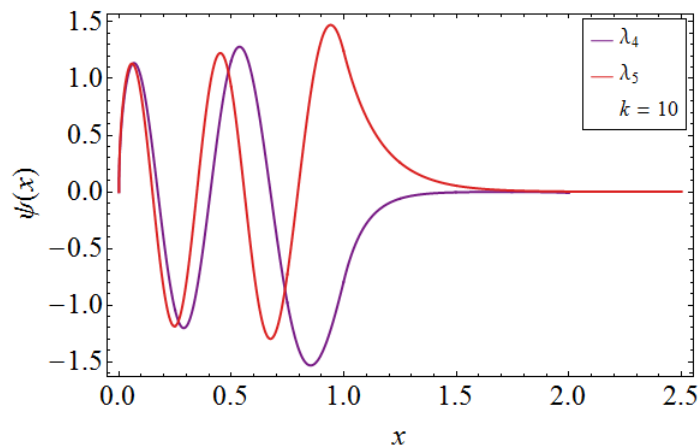
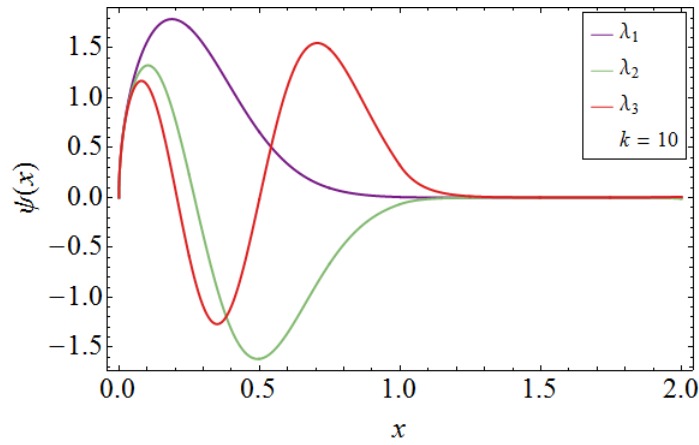


Vidimo, da je oblika zelo podobna, če ne celo enaka, kot oblika lastne funkcije $R_{n,l=n-1}(x)$ iz prejšnjega dela naloge, razlikuje se le v širini. Opazimo tudi, da je večinoma funkcija res v snovi, torej znotraj območja $x \in [0, 1]$, kar pa „štrli“ ven, pa potem že eksponentno pada.

Oglejmo si bolj zanimiv primer pri višjih vrednostih parametra k , recimo $k = 10$:

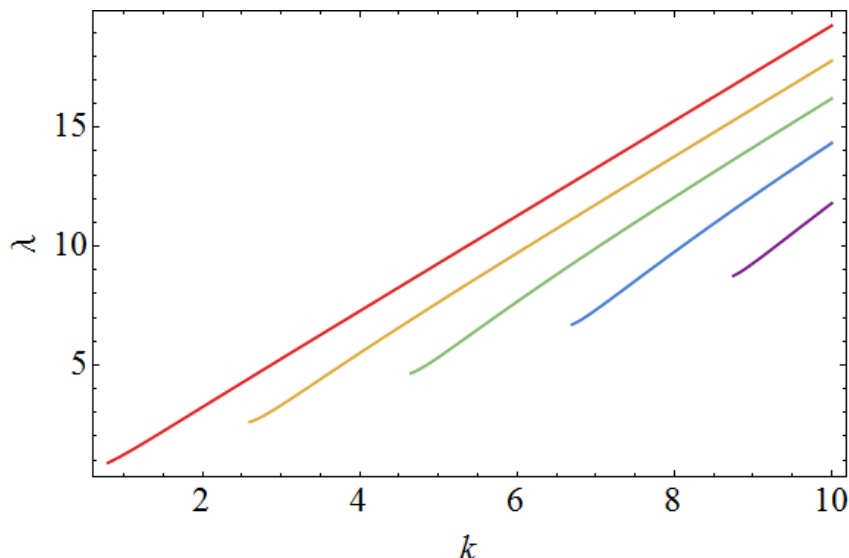


Tu nastopi več, celo 5, lastnih vrednosti λ . Sklepamo torej, da bo v našem območju parametra k število lastnih vrednosti λ med 1 in 5. Oglejmo si še te lastne funkcije:

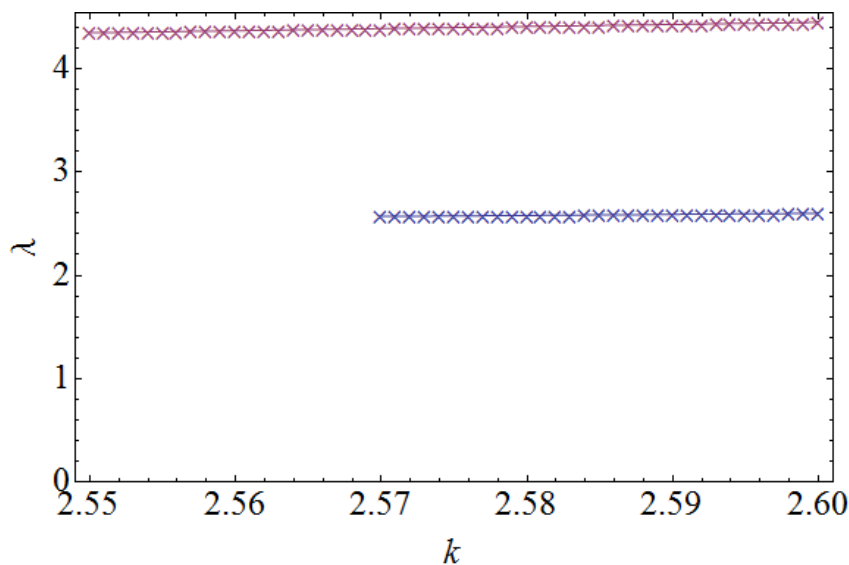


Tudi v tem primeru imajo funkcije enako obliko kot funkcije iz prvega dela naloge in se skladajo z območjem snovi.

Sedaj si končno oglejmo disperzijsko relacijo $\lambda(k)$, kjer pričakujemo eno lastno vrednost na začetku in 5 lastnih vrednosti na koncu, vmes pa razcepe, ki ne vemo kakšni so. Spodnja slika prikazuje $\lambda(k)$ za $k \in [0.8, 10]$:



Vidimo, da so disperzijske relacije bolj ali manj linearne funkcije parametra k , majhne nelinearnosti dobimo le v primerih, ko nastopi nova lastna vrednost. Takšen rezultat ni povsem nepričakovan, saj je profil $n(x)^2$ skoraj konstanten. Pobljže in natančneje si oglejmo še območje nastopa druge lastne funkcije, zato da se prepričamo, da nimamo kakšnih nenatančnosti zaradi grobih korakov, ker bi lahko s tem preskočili kakšen zvezan razcep:



Res se izkaže, da druga lastna vrednost kar naenkrat pride v našo disperzijsko relacijo, tako da izključimo možnost razcepa od prvotne lastne vrednosti. Možno, da se razlog za takšno obnašanje skriva v dejstvu, da je naš profil $n(x)$ nezvezen okoli točki $x = 1$, kar povzroči dobljeno obnašanje disperzijske relacije. Ugotovili smo, da za valovno število k iz območja $k \in [0.8, 2.57]$, kjer manjših vrednosti od spodnje meje nismo preverili, dobimo le eno vezano stanje.