

# Az 1-dimenziós Schrödinger-egyenlet numerikus megoldása

Bartha Ferenc

e-mail: barthaf@physx.u-szeged.hu, http : www.jate.u-szeged.hu/~barthaf/  
Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Fizikai Tanszék  
(Ápril 16, 2002)

## I. FELADAT:

Az időfüggő Schrödinger-egyenlet alkalmas (kényelmes) egységekben felírva

$$i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = H \psi(x, t) \quad , \quad H = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

$$\text{kezdőfeltétel : } \psi(x, t = t_0) = \psi_0(x)$$

$$\text{peremfeltétel : } \psi(\pm 1, t) = 0$$

A numerikus tárgyaláshoz szükséges, hogy a peremfeltétel a végesben legyen megadva. A kitűzött feladatban (az általánosság megsértése nélkül) a koordináta-skála választásával rögzítettük, hogy a perem  $x = -1$  és  $x = 1$  legyen.

- Keressük meg (például a Numerov-módszer segítségével) az első néhány kötött állapotot. Néhány tetszés szerinti potenciált kiválasztva oldjuk meg a kétpontos peremérték-problémát

$$H \varphi_\mu(x) = E_\mu \varphi_\mu(x) \quad , \quad \mu = 0, 1, 2, \dots, NodesMax$$

$$\text{peremfeltétel : } \varphi_\mu(x = \pm 1) = 0$$

Kezdjük a "legegyszerűbb" esettel, a  $V(x) \equiv 0$  potenciállal, hiszen erre az esetre az analitikus megoldást is ismerjük ( $\sim$ részecske dobozban).

- Az így meghatározott stacionárius állapotokból építsük fel a

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=0}^{NodesMax} \varphi_n(x) e^{-iE_n t}$$

hullámfüggvényt. Ez megoldása az időfüggő Schrödinger-egyenletnek, a numerikus módszerünket ezzel fogjuk tesztelni.

- A Crank-Nicholson sémát használva írjunk programot az időfüggő Schrödinger-egyenlet, mint kezdetiérték-probléma megoldására. Próbáljuk ki a

$$\psi(x, t = 0) = \Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{NodesMax} \varphi_n(x)$$

kezdőfeltétellel a programunkat és hasonlítsuk össze a kapott numerikus megoldást az "egzakt"  $\Psi(x, t)$ -vel.

## II. MEGJEGYZÉSEK A MELLÉKELT MEGOLDÁSHOZ

### A. A Numerov rekurzió a sajátérték problémához

A megoldandó differenciálegyenlet

$$\varphi''(x) = f(x)\varphi(x) \quad , \quad f(x) = V(x) - E$$

Taylor-sorból látható, hogy

$$\begin{aligned}\varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1} &= [\varphi'']_n h^2 + \frac{h^4}{12} [\varphi'''' ]_n + O(h^6) \\ &= [f\varphi]_n h^2 + \frac{h^4}{12} \left[ \frac{(f\varphi)_{n+1} - 2(f\varphi)_n + (f\varphi)_{n-1}}{h^2} \right] + O(h^6)\end{aligned}$$

vagyis

$$\left[ 1 - \frac{h^2}{12} f_{n+1} \right] \varphi_{n+1} - \left[ 2 + \frac{10h^2}{12} f_n \right] \varphi_n + \left[ 1 - \frac{h^2}{12} f_{n-1} \right] \varphi_{n-1} \approx 0$$

Tömörebb írással ez

$$[1 - T_{n+1}] \varphi_{n+1} - [2 + 10T_n] \varphi_n + [1 - T_{n-1}] \varphi_{n-1} \approx 0 \quad \text{ahol} \quad T(x) = \frac{h^2}{12} f(x)$$

majd kissé átrendezve

$$\frac{[1 - T_{n+1}] \varphi_{n+1}}{[1 - T_n] \varphi_n} + \frac{[1 - T_{n-1}] \varphi_{n-1}}{[1 - T_n] \varphi_n} = \frac{[2 + 10T_n]}{[1 - T_n]}$$

Az egyenlet ebben az alakjában igen alkalmas a probléma tárgyalására, hiszen a következő rekurziókra vezet

$$\text{előre: } R_{n+1}^+ = U_n - 1/R_n^+ \quad \text{vagy} \quad \text{hátra: } R_{n-1}^- = U_n - 1/R_n^-$$

ahol

$$R_{n+1}^+ = \frac{[1 - T_{n+1}] \varphi_{n+1}}{[1 - T_n] \varphi_n}, \quad R_{n-1}^- = \frac{1}{R_n^+} = \frac{[1 - T_{n-1}] \varphi_{n-1}}{[1 - T_n] \varphi_n}, \quad U = \frac{[2 + 10T]}{[1 - T]}$$

Ha a beosztást úgy választottuk, hogy  $x_1 = -1$  és  $x_N = 1$ , akkor

$$\varphi_1 = 0 \rightarrow R_2^+ = \infty \quad \text{és} \quad \varphi_N = 0 \rightarrow R_{N-1}^- = \infty$$

Balról indulva az előre rekurziót tudjuk hajtani ( $[R_2^+] \rightarrow R_3^+ \rightarrow R_4^+ \rightarrow \dots$ ) és a jobb oldali peremtől pedig a hátra rekurziót ( $[R_{N-1}^+] \rightarrow R_{N-2}^+ \rightarrow R_{N-3}^+ \rightarrow \dots$ ) használhatjuk. A programozott eljárásban balról haladunk mindaddig, míg  $R_n^+ \leq 1$ . Az  $R_M^+ \approx 1$  osztópontnál megállunk az előre rekurzióval és a másik szélről belépegetünk ehhez a találkozási ponthoz. A találkozásnál kiszámolt

$$|R_{M \rightarrow}^+ - 1/R_{M \leftarrow}^-| = \Delta(E)$$

mennyiség alkalmas annak az eldöntésére, hogy az aktuális energia sajátenergia-e, hiszen sajátállapotban

$$\Delta(E_\mu) \approx 0$$

- Az alapállapot (és így minden sajátállapot) energiájára alsó korlátot adhatunk, hiszen (miért?)

$$E_0 \geq V_{\min} \frac{\pi^2}{4} \quad \text{ahol} \quad V_{\min} = \min \{V(x) \mid x \in [-1, 1]\}$$

- Az 1-dimenziós Schrödinger-egyenlet kötött állapotairól tudjuk, hogy az energiájuk szerint növekvő sorba rendezett  $\{\varphi_\mu(x), \mu = 0, 1, 2, \dots\}$  függvényekre igaz, hogy  $\varphi_\mu(x)$ -nek pontosan  $\mu$  darab belső zéróhelye van. A Numerov integrálás során megszámláljuk, hogy az aktuális  $E$  érték mellett  $R$  hány osztópontnál negatív, ez adja a zéróhelyek számát. Tekintettel arra, hogy "normális" körülmények között

$$T(x) = \frac{h^2}{12} [V(x) - E] < 1$$

$R_{n-1}^-$  negatív értéke valóban azzal kapcsolatos, hogy  $\varphi_{n-1}$  és  $\varphi_n$  ellenkező előjelű.

- Az  $m = 0, 1, 2, \dots, N_{\max}$  adott számú zéróhellyel rendelkező megoldás keresésekor az energiát növeljük, ha a próba során kevesebb zéróhelyet és csökkentjük, ha többet találtunk. Ha a zéróhelyek száma megfelelő (és bízunk abban, hogy közel járunk az igazi sajátértékhez) lineáris extrapolációval keressük a  $\Delta(E) = 0$  egyenlet gyökét. Ez az eljárás alaposan eltévedhet, de nem volt most cél, hogy univerzális (idiótabiztos) eljárást adjunk.

## B. Crank-Nicholson eljárás az időfejlődéshez

A beprogramozott eljárás a CN formulát használja:

$$-a\psi_{j+1}^{n+1} + (1 + 2a + b_j)\psi_j^{n+1} - a\psi_{j-1}^{n+1} = a\psi_{j+1}^n + (1 - 2a - b_j)\psi_j^n + a\psi_{j-1}^n; \quad a = \frac{i\delta t}{2(\delta x)^2}; \quad b_j = \frac{i\delta t}{2}V(x_j)$$

vagy mátrix alakban

$$\mathbf{A} \cdot \psi^{n+1} = \mathbf{d} \quad \text{ahol} \quad \mathbf{d}_j = a\psi_{j+1}^n + (1 - 2a - b_j)\psi_j^n + a\psi_{j-1}^n$$

és  $\mathbf{A}$  tridiagonális mátrix:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ AL_2 & AD_2 & AU_2 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & AL_3 & AD_3 & AU_3 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \ddots & \ddots & \ddots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \ddots & \ddots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & AL_{N-1} & AD_{N-1} & AU_{N-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \left\{ \begin{array}{l} AL_j = AU_j = -a \\ AD_j = 1 + 2a + b_j \end{array} \right. \quad j = 2, \dots, N-1$$