

Stany związane

Andrzej Baran

18 stycznia 2017

UMCS

Macierzowy algorytm Numerowa

Algorytm Numerowa dla równania

$$\psi''(x) = f(x)\psi(x), \quad (1)$$

(dla równania Schroedingera $f(x) = -2m(E - V(x))/\hbar^2$) na sieci punktów x_i odległych o d jest

$$\psi_{i+1} = \frac{\psi_{i-1}(12 - d^2 f_{i-1}) - 2\psi_i(5d^2 f_i + 12)}{d^2 f_{i+1} - 12} + O(d^6) \quad (2)$$

gdzie np. $\psi_i = \psi(x_i)$. Można to przedstawić w postaci

$$\begin{aligned} & -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1})}{d^2} + \frac{V_{i-1}\psi_{i-1} + 10V_i\psi_i + V_{i+1}\psi_{i+1}}{12} \\ & = E \frac{(\psi_{i-1} + 10\psi_i + \psi_{i+1})}{12}. \end{aligned} \quad (3)$$

Reprezentując ψ w postaci wektora $(\dots, \psi_{i-1}, \psi_i, \psi_{i+1}, \dots)$ i definiując macierze $A = (I_{-1} - 2I_0 + I_1)/d^2$, $B = (I_{-1} + 10I_0 + I_1)/12$, $V = \text{diag}(\dots V_{i-1}, V_i, V_{i+1}, \dots)$, gdzie I_p oznacza macierz jedynek na diagonalu p i zer w pozostałej części, równanie to zapiszemy w postaci

$$-\frac{\hbar^2}{2m}A\psi + BV\psi = EB\psi. \quad (4)$$

Mnożąc przez B^{-1} mamy

$$-\frac{\hbar^2}{2m}B^{-1}A\psi + V\psi = E\psi. \quad (5)$$

Warunki brzegowe określimy, biorąc podmacierze $N \times N$ macierzy A, B . Odpowiada to warunkom $\psi_0 = \psi_{N+1} = 0$, co efektywnie oznacza umieszczenie potencjału w pudle o nieskończonych ścianach.

Alternatywą jest przyjęcie warunków okresowych z $A_{1,N} = A_{N,1} = 1/d^2$ i $B_{1,N} = B_{N,1} = 1/12$.

Chcemy znaleźć stany dla $E < E_{max}$. Minimalna długość fali de Broglie'a λ jest w tym wypadku równa $\lambda = h/\sqrt{2mE_{max}}$. Praktyka pokazuje, że wystarczającą dokładność otrzymuje się jeśli krok d sieci ma wartość równą jednego punktu na radian, tzn. $d = \lambda/2\pi$. Znajomość punktów zwrotnych x_t takich, że $V(x_t) = E_{max}$ oraz przyjęcie założenia, że w obszarach wzbronionych ($E < V$) dodajemy dodatkowo 2λ , daje dla liczby punktów sieci wartość $N = 2(x_t/d + 4\pi)$ zaokrągloną do liczby całkowitej.

Przykład. $V = |x|$. I

Potencjał $V = b|x|$ jest rozwiązywalny dokładnie co jest ważne dla sprawdzenia. R. Sch. jest

$$-\frac{\hbar}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + bx\psi = E\psi. \quad (6)$$

Przy oznaczeniach

$$x = as, \quad a = \left(\frac{\hbar^2}{mb}\right)^{1/3}, \quad W = \frac{\hbar^2}{ma^2}, \quad \epsilon = \frac{E}{W}, \quad \xi = (s - \epsilon) \quad (7)$$

otrzymamy równanie Airy'ego, którego rozwiązaniem są funkcje Airy'ego: $Ai(\sqrt[3]{2}\xi)$ i $Bi(\sqrt[3]{2}\xi)$. Funkcja $Bi \rightarrow \infty$ dla $\xi \rightarrow \infty$ i nie jest wobec tego rozwiązaniem fizycznym, a więc

$$\psi_n(\xi) = C_n Ai(\sqrt[3]{2}\xi_n), \quad (8)$$

gdzie C_n jest stałą normalizacyjną.

Rozwiązanie jest słuszne dla $s > 0$. Z własności symetrii potencjału wynika, że rozwiązania dla $s < 0$ otrzymamy z otrzymanych rozwiązań. Ponieważ

$$\psi^{even}(s) = \psi^{even}(-s), \quad \psi^{odd}(s) = -\psi^{odd}(-s) \quad (9)$$

to żądamy by

$$\psi^{odd}(0) = Ai(-\sqrt[3]{2}\epsilon_k) = 0, \quad \frac{d\psi_k^{even}}{ds} = Ai'(-\sqrt[3]{2}\epsilon_k) = 0, \quad (10)$$

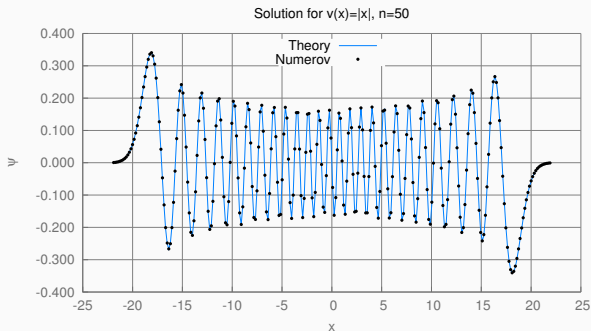
dla numerycznych rozwiązań nieunormowanych. Stałą normalizacyjną C_n oblicza się wg, wzoru

$$C_n = 2^{-1/3} \left[\int_{-\sqrt[3]{2}\epsilon_n}^{\infty} Ai(\xi_n)^2 d\xi_n \right]^{-1/2}. \quad (11)$$

Równania (10) określają wartości własne dla rozwiązań *odd* i *even*.
Dochodzimy do wniosku, że energie własne E_n są dane przez

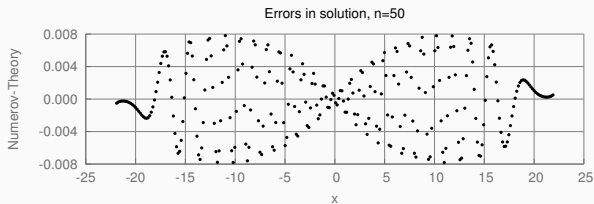
$$E_n = \epsilon_n W = \epsilon_n \left(\frac{\hbar^2 b^2}{m} \right)^{1/2}. \quad (12)$$

Przykład. $V = |x|$. IV



Rysunek 1: Przykład rozwiązań dokładnych w przypadku $V \sim |x|$ dla $n = 50$. Punkty odpowiadają rozwiązaniu z wykorzystaniem macierzowego algorytmu Numerowa.

Przykład. $V = |x|$. \mathbf{V}



Rysunek 2: Błąd rozwiązań Numerowa w przypadku $V \sim |x|$ dla $n = 50$.
Pokazano różnicę $\psi_{\text{Numerow}} - \psi_{\text{analityczne}}$.

Tablica 1: Comparison of exact and numerical results for the quantized energies (in scaled units, see text) of the $|x|$ potential. The numerical results are calculated on an $N = 278$ point grid with a spacing of 0.158 in scaled distance units.

	n=1	2	3	4	10	20	50
Exact	0.8086	1.8558	2.5781	3.2446	6.3053	10.182	18.947
Numerov	0.8099	1.8557	2.5785	3.2445	6.3049	10.181	18.936
3-pt	0.8089	1.8529	2.5728	3.2358	6.2717	10.094	18.63

W trzecim wierszu Tablicy zamieszczono wyniki obliczeń w przypadku zastąpienia drugiej pochodnej formułą 3-punktową, co jest równoważne przyjęciu, że macierz $B = I$. Wyniki dla dużych n są nieco gorsze od dokładnych wyników metody Numerova.

Zadania I

Napisać procedurę obliczania sferycznych funkcji Bessela $j_l(x)$ i $n_l(x)$.

Wykorzystać związek rekurencyjny

$$s_{l+1}(x) + s_{l-1}(x) = \frac{2L+1}{x} s_l(x), \quad (13)$$

gdzie s_l oznacza albo j_l , albo n_l . Wykorzystać wyrażenia dla j_l , n_l , $l = 0, 1$:

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}, \quad n_0(x) = -\frac{\cos x}{x} \quad (14)$$

$$j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}, \quad n_1(x) = \frac{\cos x}{x^2} - \frac{\sin x}{x}. \quad (15)$$

Relacje rekurencyjne mają dwa niezależne rozwiązania, z których jedno może silnie rosnać z l . Dlatego też, ze względu na błędy numeryczne, rozwiązanie, które nas interesuje, może być niestabilne (błędy zaokrążeń). Zdarza się to w przypadku j_l dla l znacznie większych niż x . Dla obliczenia j_l należy więc stosować metodę zstępującą. Kładziemy $s_{l_{\max}+1} = 0$, a $s_{l_{\max}} = \delta$, gdzie δ jest małą liczbą. Rekurencję prowadzimy *w dół*, aż do interesującej nas wartości l . Zauważmy, że normalizacja rozwiązania jest

Zadania II

wyznaczona przez δ , a więc jest w tym sensie dowolna. Aby uzyskać właściwą wartość j_l należy rekurencję prowadzić do $l = 0$ i następnie, korzystając z faktu, że $(j_0(x) - xj_1(x)) \cos x + xj_0(x) \sin x = 1$ wyznaczyć stałą normalizacyjną.





Górna wartość L_{\max} , od której zaczynamy rekurencję powinna być w miarę duża. Przyjąć, że

$$L_{\max} = \max \left\{ \left[\frac{3[x]}{2} + 20, l + 20 \right] \right\},$$

gdzie $[x]$ oznacza największą liczbę całkowitą mniejszą od x , a l odpowiada wartości l obliczanej funkcji Bessela.

Napisać funkcję obliczającą $j_l(x)$. Sprawdzić wynik, przyjmując, że

$$j_5(1.5) = 6.69620596 \times 10^{-4}, \quad n_5(1.5) = -94.2361101.$$

-  J.L. Quiroz Gonzáles, D. Thompson: Getting started with Numerov Method, *Computers in Physics*, **11**, Sep/Oct 1997.
-  Stephen B. Haley, An Underrated entanglement: Riccati and Schrödinger equations, *Am. J. Phys.*, **65**, March 1997, pp 237–243.
-  Mohandas Pillai, Joshua Goglio, and Thad G. Walkera. Matrix Numerov method for solving Schrödinger's equation. *Am. J. Phys.*, 80 (11), November 2012, p 1017-1019.
-  Computation of special functions. Shanjie Zhang and Jianming Jin. John Wiley Sons, Inc. 1996.

Thank you!

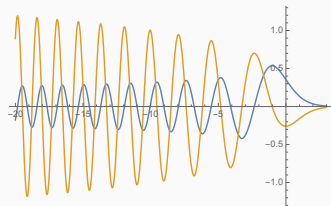
Całkę z równania (11) dla normy można zapisać w postaci

$$\begin{aligned} I_m &= \int_{-\sqrt[3]{2}\epsilon_m}^{\infty} Ai(s - \epsilon_m)^2 ds \\ &= \sum_{k=1}^m \int_{z_m}^{z_{m-1}} Ai^2(s) ds + \int_{z_1}^0 Ai^2(s) ds + \int_0^{\infty} Ai^2(s) ds, \end{aligned} \quad (16)$$

gdzie z_k jest kolejnym zerem $Ai(s)$, $Ai'(s)$ (Patrz Rysunek (3)). Ostatnią całkę można obliczyć analitycznie. Jest ona równa

$$\int_0^{\infty} Ai^2(s) ds = \frac{1}{3^{2/3}\Gamma^2(1/3)} = 0.06698748377966397. \quad (17)$$

Pozostałe całki oblicza się numerycznie metodą Gaussa lub Gaussa-Kronroda między kolejnymi zerami Ai , Ai' i między z_1 i 0.



Rysunek 3: Funkcja $Ai(s)$ i jej pochodna $Ai'(s)$.

Zera funkcji Airy'ego znajdujemy numerycznie, korzystając, np. z procedur numerycznych z pracy Shanjie Zhang i Jianming Jin [4].