Numeričko rješavanje Schrödingerove jednadžbe

Mandarić, Marko

Undergraduate thesis / Završni rad

2020

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Split, University of Split, Faculty of science / Sveučilište u Splitu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:166:069189

Rights / Prava: Attribution 4.0 International/Imenovanje 4.0 međunarodna

Download date / Datum preuzimanja: **2024-04-23**

Repository / Repozitorij:

Repository of Faculty of Science

zir.nsk.hr

UNIVERSITY OF SPLIT

dabar

DIGITALNI AKADEMSKI ARHIVI I REPOZITORIJI

Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno – matematički fakultet

NUMERIČKO RJEŠAVANJE SCHRÖDINGEROVE JEDNADŽBE

Završni rad / Bachelor thesis

Marko Mandarić

Split, rujan 2020.

Temeljna dokumentacijska kartica

Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno – matematički fakultet
Odjel za fiziku
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split, Hrvatska

Završni rad

Numeričko rješavanje Schrodingerove jednadžbe

Marko Mandarić

Sveučilišni preddiplomski studij Fizika

Sažetak:
U ovom završnom radu obrađuje se vremenski neovisna Schrodingerova jednadžba te njeno rješavanje na dva različita načina, analitički i numerički. Cilj je rada pokazati može li se jednadžbu dovoljno precizno riješiti numeričkom metodom uz pomoć računala, što bi omogućilo rješavanje nekih kompliciranijih slučajeva koji nisu analitički rješivi. Konkretno je prikazano rješenje za oscilirajuću česticu u harmonijskom potencijalu. Diskutira se i ovisnost preciznosti numeričkog rješenja o parametrima u samoj metodi. U radu je prezentiran algoritam koji numerički rješava Schrodingerovu jednadžbu. Rastom moći računala, ubuduće ćemo sigurno moći unaprijediti i brzinu i preciznost rješavanja i za kompliciranije probleme od onog ovdje prikazanog.

Ključne riječi: harmonijski oscilator, Schrodingerova jednadžba, analitičko rješenje, numerička metoda

Rad sadrži: 18 stranica, 12 slika, 1 tablicu. Izvornik je na hrvatskom jeziku

Mentor: doc. dr. sc. Toni Šćulac

Ocjenjivači: doc. dr. sc. Toni Šćulac
prof. dr. sc. Mile Dželalija
doc. dr. sc. Petar Stipanović

Rad prihvaćen: 16.9.2020.

Rad je pohranjen u knjižnici Prirodoslovno – matematičkog fakulteta, Sveučilišta u Splitu.

Basic documentation card

University of Split
Faculty of Science
Department of Physics
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split, Croatia

Bachelor thesis

Numerical solution of the Schrodinger equation

Marko Mandarić

University undergraduate study programme Physics

Abstract:
This bachelor thesis deals with the time-independent Schrodinger equation and the two ways of solving it: analytical and numerical. The goal is to show whether the equation can be solved precisely enough numerically on the computer, which would allow solutions for complicated cases that don't have analytical solutions. Specifically, a solution for a particle in a harmonic potential is discussed. Dependence of the accuracy of the numerical solution on the parameters in the method itself is also discussed. This work presents an algorithm for the numerical solution of the Schrodinger equation. With the growth of computer power in the future, we will definitely be able to improve both the speed and precision of solving even more complicated problems than the one depicted here.

Keywords: harmonic oscillator, Schrodinger equation, analytical solution, numerical method

Thesis consists of: 18 pages, 12 figures, 1 table. Original language: Croatian

Supervisor: Assist. Prof. Dr. Toni Šćulac

Reviewers: Assist. Prof. Dr. Toni Šćulac
Prof. Dr. Mile Dželalija
Assist. Prof. Dr. Petar Stipanović

Thesis accepted: 9/16, 2020.

Thesis is deposited in the library of the Faculty of Science, University of Split.

Sadržaj

1 Uvod 1

2 Analitičko rješenje 4

2.1 Slobodna čestica 4

2.2 Harmonijski oscilator 5

3 Numeričko rješenje 7

3.1 Opis metode 7

3.2 Algoritam 8

3.3 Grafički prikaz rezultata 9

4 Zaključak 17

5 Literatura 18

1 Uvod

Krajem 19. i početkom 20. stoljeća klasična fizika uznapredovala je toliko da je mogla objasniti gotovo sve, uz nekolicinu neobjašnjenih problema koje se smatralo tvrđim orasima. Jako tvrdim, istina, ali, u suštini, savladivim preprekama. „Još samo da to nekako riješimo i došli smo do vrhunca razvoja fizike“, smatrali su znanstvenici toga doba. Ipak, konstantni neuspjesi klasične teorije u pokušaju objašnjavanja problema, primjerice, zračenja crnog tijela i fotoelektričnog učinka, doveli su do novih pretpostavki, ideja i spoznaja-rodila se nova znanstvena grana, kvantna mehanika.

Kronološki, klasična mehanika prethodila je kvantnoj i to se činilo logičnim. Tako idalje učimo, tijekom svog školovanja. Klasični je pogled na svijet intuitivan, razumljiv i, na kraju krajeva, uspješan u objašnjavanju većine problema. Da ste nekome 1900. godine rekli kako je cijela klasična fizika samo (ne)dovoljno dobra aproksimacija te da postoji puno fundamentalniji opis stvarnosti, tko bi vam vjerovao? Pa opet, Planck, Bohr, Schrodinger i mnogi drugi pokazali su da je doista tako. Počelo je novo, kvantno doba. Učenje o kvantnoj mehanici zahtijeva promjenu načina razmišljanja i logike. Sustavi se opisuju drukčije, mjerenja su drukčija, probabilističko mijenja deterministično. Čak je i osnovna podjela materije na valove i čestice došla u pitanje, tj. izbrisana je ta granica. Mnogi su kvantni fenomeni kontraintuitivni i teško ih je predočiti, vizualizirati, a ipak, imaju svoje eksperimentalne dokaze.

U klasičnom pogledu, stanje čestice određeno je, u bilo kojem vremenu t, sa dvije osnovne dinamičke varijable: položajem i količinom gibanja. Bilo koja druga relevantna veličina može se izračunati preko ove dvije. Također, pomoću Hamiltonovih jednadžbi gibanja

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \tag{1}$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} \tag{2}$$

gdje je x položaj, p količina gibanja, a H hamiltonijan sustava, možemo predvidjeti vrijednost položaja i momenta u bilo kojem kasnijem trenutku t'.

Kvantnomehanički pandan ovome jesu postulati pomoću kojih definiramo kako matematički opisati kvantno stanje u vremenu t, računati fizikalne veličine tog stanja te opisati vremensku evoluciju sustava.

Pet postulata kvantne mehanike:

1. Stanje sustava u bilo kojem trenutku t određeno je vektorom stanja $|\psi(t)>$ u Hilbertovom prostoru H. $|\psi(t)>$ sadrži sve potrebne informacije o sustavu.
2. Za svaku fizikalno mjerljivu veličinu (opservablu) A postoji odgovarajući linearni hermitski operator $\widehat{\mathrm{A}}$ čije svojstvene vrijednosti čine potpunu bazu.

3. Mjerenje opservable A može se formalno prikazati kao djelovanje operatora $\hat{\mathrm{A}}$ na vektor stanja $|\psi(t)>$. Jedini mogući rezultat mjerenja je neka od realnih svojstvenih vrijednosti operatora, a_n. Ako mjerenjem A u stanju $|\psi(t)>$ dobijemo rezultat a_n, sustav odmah nakon mjerenja prelazi u stanje $|\psi_n>$:

$$\hat{\mathrm{A}}\,|\psi(t)> = a_n|\psi_n> \tag{3}$$

$$a_n = \langle\psi_n|\psi(t)\rangle \tag{4}$$

4. Ishod mjerenja je probabilistički, za razliku od klasičnog deterističkog. Nakon mjerenja, sustav ostaje u svojstvenom stanju koje odgovara izmjerenoj svojstvenoj vrijednosti (mjerenje utječe na sustav).
5. Vremenska evolucija vektora stanja uređena je vremenski ovisnom Schrodingerovom jednadžbom

$$i\hbar\frac{\partial|\psi(t)>}{\partial t} = \hat{\mathrm{H}}|\psi(t)> \tag{5}$$

gdje je $\hat{\mathrm{H}}$ operator hamiltonijana koji odgovara ukupnoj energiji sustava.

Korištenje oznake $|\psi(t)>$ rezultat je Diracove bra-ket notacije za vektore u Hilbertovom prostoru, a u daljnjem tekstu ću se koristiti drugačijom oznakom, valnom funkcijom, $\psi(t)$.

Jednadžba (5) predstavlja jedan od temelja kvantne mehanike i jedan od njenih najpoznatijih i najvažnijih rezultata. I tema ovog rada bit će Schrodingerova jednadžba, ali u drugačijem obliku. U ovom općenitom zapisu jasno je da se radi o vremenski ovisnoj jednadžbi. Ona vrijedi za bilo koji sustav. Odaberimo česticu mase m u nekom potencijalu. Tada nam je poznat njen hamiltonijan:

$$\hat{\mathrm{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{\mathrm{V}}(\vec{r},t) \tag{6}$$

pa jednadžbu pišemo

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) + \hat{\mathrm{V}}(\vec{r},t)\psi(\vec{r},t) \tag{7}$$

Razmatrat ćemo slučaj čestice u vremenski neovisnom potencijalu $\hat{\mathrm{V}}(\vec{r},t) = \hat{\mathrm{V}}(\vec{r})$. Tada je i hamiltonijan vremenski neovisan, što nam omogućava separaciju varijabli (u ovisnosti o položaju i o vremenu), odnosno rješenje jednadžbe možemo prikazati ovako: $\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})f(t)$. Kada to uvrstimo u (7) i podijelimo obe strane jednadžbe s $\psi(\vec{r})f(t)$ dobijemo

$$i\hbar\frac{1}{f(t)}\frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{\psi(\vec{r})}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + \hat{\mathrm{V}}(\vec{r})\psi(\vec{r})\right] \tag{8}$$

Lijeva strana jednadžbe (8) ovisi samo o vremenu, a desna samo o položaju. Zaključak: obje strane moraju biti jednake konstanti, i to konstanti dimenzije energije, pa je označimo sa E.

Metoda separacije varijabli je dovršena kad napišemo nove dvije jednadžbe, obje u ovisnosti o jednom od parametara:

$$i\hbar \frac{df(t)}{dt} = Ef(t) \tag{9}$$

$$\underbrace{\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{\mathrm{V}}(\vec{r})\right]}_{\hat{\mathrm{H}}} \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \tag{10}$$

Rješenje jednadžbe (9) je jednostavno, $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$, tako da imamo $\psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar}$, a takva rješenja Schrodingerove jednadžbe za vremenski neovisne potencijale nazivamo stacionarnim stanjima jer gustoća vjerojatnosti ne ovisi o vremenu ($|\psi(\vec{r}, t)|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$).

Jednadžba (10) je vremenski neovisna Schrodingerova jednadžba. To je jednadžba svojstvenih vrijednosti operatora hamiltonijana, a one su moguće mjerljive energije. U ovom radu pokazat ću na primjeru kako se ta jednadžba rješava analitički, a onda i numerički. Glavni cilj ovog rada je pokazati kako možemo Schrodingerovu jednadžbu precizno riješiti numerički. U svrhu pojednostavljivanja radit ću s vremenski neovisnom Schrodingerovom jednadžbom u jednoj prostornoj dimenziji.

Prvo ću pokazati analitičko rješavanje u idućem poglavlju, pa prijeći na opis numeričke metode i implementaciju algoritma. Na kraju su grafički prikazani rezultati i diskutirane daljnje mogućnosti unaprjeđenja algoritma.

2 Analitičko rješenje

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \hat{\mathrm{V}}(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{11}$$

Rješenja jednadžbe (11) daju dozvoljene svojstvene vrijednosti energije E_n i pripadne valne funkcije $\psi_n(x)$. Za rješavanje ove diferencijalne jednadžbe nužno je poznavati potencijal $\hat{\mathrm{V}}(x)$ i rubne uvjete, a to određujemo ovisno o prirodi fizikalnog problema. Najjednostavniji od tih primjera je slobodna čestica.

2.1 Slobodna čestica

Potencijal u cijelom prostoru iznosi 0, pa se Schrodingerova jednadžba svodi na

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x) \rightarrow \left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2\right)\psi(x) = 0, \tag{12}$$

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \tag{13}$$

gdje je k valni broj. Opće rješenje ovakve jednadžbe je kombinacija dvaju ravnih valova $\psi_k(x) = A_+e^{ikx} + A_-e^{-ikx}$. To bi značilo da je ukupna valna funkcija stacionarnog stanja $\psi_k(x,t) = A_+e^{i(kx-\omega t)} + A_-e^{-i(kx+\omega t)} = A_+e^{i(kx-\frac{\hbar k^2 t}{2m})} + A_-e^{-i(kx+\frac{\hbar k^2 t}{2m})}$. Prvi član predstavlja val koji se kreće udesno, a drugi ulijevo. Ipak, nekoliko je problema s ovim matematičkim rješenjem koji ga čine fizikalno neprihvatljivim. Na primjer, brzina vala iznosi

$$v_w = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{\hbar k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m\hbar k} = \frac{\hbar k}{2m} \tag{14}$$

a brzina čestice

$$v_p = \frac{p}{m} = \frac{\hbar k}{m} = 2v_w \tag{15}$$

pa ispada da se čestica kreće duplo brže nego val koji je predstavlja, što je nelogično. Također, važan uvjet za valnu funkciju je da je kvadratno integrabilna, kako bi se mogla normalizirati. U slučaju funkcija $\psi_+(x) = A_+e^{ikx}$ i $\psi_-(x) = A_-e^{-ikx}$, to nije zadovoljeno:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{\pm}^{*}(x,t)\psi_{\pm}(x,t)dx = \left|A_{\pm}\right|^2\int_{-\infty}^{\infty}dx \rightarrow \infty \tag{16}$$

Rješenje problema nalazimo tako da konstruiramo fizikalno rješenje superpozicijom ravnih valova-valni paket.

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(k)e^{i(kx-\omega t)}dk \tag{17}$$

gdje je $\phi(k)$ amplituda valnog paketa, Fourierov transformat od $\psi(x,0)$, tj.

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0) e^{-ikx} dx \tag{18}$$

Primjer slobodne čestice je jako jednostavan i nije toliko zanimljiv za implementiranje numeričke metode. To ću učiniti za kompliciraniji slučaj i to na problem harmonijskog potencijala.

2.2 Harmonijski oscilator

Harmonijski oscilator kao model susrećemo u raznim granama fizike; klasičnoj mehanici, elektrodinamici, nuklearnoj fizici, fizici čvrstog stanja itd., pa tako i u kvantnoj mehanici. Koristi se za opis čestice mase m koja oscilira kutnom frekvencijom ω pod utjecajem harmonijskog potencijala, a njezin hamiltonijan u jednoj dimenziji ima oblik:

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{X}^2 \tag{19}$$

Zanimljivo je napomenuti da, osim analitičkog rješavanja Schrodingerove jednadžbe s ovakvim hamiltonijanom, postoji još jedna metoda rješavanja ovog problema. To je metoda ljestvi, ali ona se bavi algebrom operatora, koristi operatore kreacije i anihilacije u matričnoj reprezentaciji kvantne mehanike. Ta je metoda smišljena kako bi se zaobišla nešto teža matematika potrebna za analitičko rješenje Schrodingerove jednadžbe za potencijal $V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$. Ovdje neću ulaziti u to, nego pokazati korake u analitičkoj metodi. Važno je da se, naravno, koju god metodu koristili, dolazi do istog rezultata za valnu funkciju.

Jednadžba, dakle, glasi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \psi(x) = E\psi(x) \tag{20}$$

što možemo zapisati kao

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{x^2}{x_0^4} \right) \psi(x) = 0, \tag{21}$$

gdje je $x_0 = \sqrt{\hbar/(m\omega)}$ konstanta dimenzija duljine. Ovakva diferencijalna jednadžba bila je poznata matematičarima davno prije nastanka kvantne mehanike. Rješenja se izražavaju preko posebnih vrsta funkcija, Hermitovih polinoma. Budući da imamo u jednadžbi član $x^2\,\psi(x)$, nameće nam se kao pokušaj rješenja gausijanska funkcija

$$\psi(x) = f(x) e^{-\frac{x^2}{2x_0^2}}, \tag{22}$$

gdje je minus u eksponentu nužan jer u suprotnom valna funkcija divergira u beskonačnosti, što je fizikalno neprihvatljivo. Kada (22) uvrstimo u (21) dobijemo diferencijalnu jednadžbu za $f(x)$ koja se rješava razvojem u red potencija:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \tag{23}$$

koji, uvršten u jednadžbu, daje rekurzijsku relaciju. Zahtjev da valna funkcija svugdje, pa i u beskonačnosti, mora biti konačna nalaže da, za neki konačni n, razvoj $f(x)$ u red mora iščeznuti. Rekurzijska relacija daje izraz za diskretne (kvantizirane) svojstvene vrijednosti energije:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad (n = 0,1,2,3,\dots) \tag{24}$$

Konačno, izračunom koeficijenata a_n i sređivanjem izraza, dolazimo do fizikalno prihvatljive valne funkcije koja zadovoljava jednadžbu (20):

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}\, 2^n\, n!\, x_0}} e^{-\frac{x^2}{x_0^2}} H_n\left(\frac{x}{x_0}\right) \tag{25}$$

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \tag{26}$$

Jednadžbom (26) definirani su Hermitovi polinomi. Uvrštavanjem $n = 0,1,2,\dots$ lako dođemo do prvih nekoliko funkcija:

$$H_0(y) = 1,\ \ H_1(y) = 2y,\ \ H_2(y) = 4y^2 - 2,$$
$$H_3(y) = 8y^3 - 12y,\ \ H_4(y) = 16y^4 - 48y^2 + 12 \tag{27}$$

Ovim ćemo se funkcijama služiti za vizualni prikaz rješenja, kada budemo crtali analitičku funkciju.

3 Numeričko rješenje

Numeričko rješavanje matematičkih problema ima široku primjenu u znanosti. Koristi se za određivanje rješenja problema koji bi kroz svoj standardni postupak predugo trajali (primjerice sustav od tisuću jednadžbi s tisuću nepoznanica) ili kad se aproksimacijama zamjenjuje stvarna vrijednost funkcije do koje je teško ili nemoguće doći analitički.

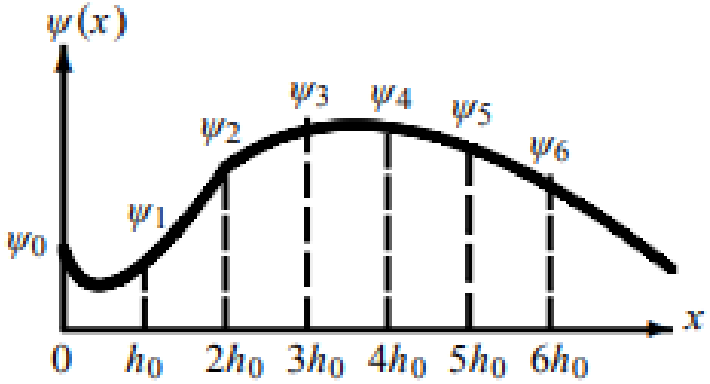
3.1 Opis metode

Jednadžba koju ovdje numerički rješavamo je:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0, \quad k^2 = \frac{2m[E-V(x)]}{\hbar^2}. \tag{28}$$

U ovom primjeru nije nemoguće doći do analitičkog rješenja, ali on će poslužiti za demonstraciju metode. Osnovni princip leži u aproksimiranju vrijednosti funkcije diskretizacijom prostora. Razlog za to je način rada računala; ono funkcionira u diskretnom svijetu. Ipak, kontinuiranost matematičkih funkcija možemo približno simulirati ukoliko prostor podijelimo na mnoštvo jako bliskih točaka kojima pridružimo neku vrijednost funkcije. Što su točke podjele bliže, tj. na što više dijelova razlomimo prostor (npr. x-os), očekujemo precizniji rezultat, budući da računalo barata s većim brojem informacija.

Sukladno tome, prvi korak u našem problemu je podjela x-osi na ekvidistantne točke s razmakom $h_0 = \Delta x$, kao na slici 1.



***Slika 1**. Diskretizacija valne funkcije (slika preuzeta iz[1])*

Valna funkcija može se aproksimirati njenim vrijednostima na točkama podjele x-osi ($\psi_0 = \psi(x=0), \psi_1 = \psi(h_0), \psi_2 = \psi(2h_0)$, itd.). Prva derivacija valne funkcije aproksimira se sa:

$$\frac{d\psi}{dx} \approx \frac{\psi_{n+1}-\psi_n}{h_0} \tag{29}$$

Druga derivacija je nešto složenija. Jedna od efikasnijih metoda aproksimacije je Numerovljev algoritam, tj. aproksimacija trima točkama:

$$\frac{\psi_{n+1}-2\psi_n+\psi_{n-1}}{h_0^2} = \psi_n'' + \frac{h_0^2}{12}\psi_n'''' + 0\left({h_0}^4\right) \tag{30}$$

Iz (28) imamo:

$$\psi_n'''' = \frac{d^2}{dx^2}(-k^2\psi)|_{x=x_n} = -\frac{\left(k^2\psi\right)_{n+1}-2\left(k^2\psi\right)_n+\left(k^2\psi\right)_{n-1}}{h_0^2} \tag{31}$$

Kad uvrstimo (31) u (30) uz $\psi_n'' = -k_n^2\psi_n$ dobijemo relaciju:

$$\psi_{n+1} = \frac{2\left(1-\frac{5}{12}h_0^2k_n^2\right)\psi_n-\left(1+\frac{1}{12}h_0^2k_{n-1}^2\right)\psi_{n-1}}{1+\frac{1}{12}h_0^2k_{n+1}^2} \tag{32}$$

Vidmo da bismo iz ove relacije, kad bismo poznavali ψ_0 i ψ_1, mogli izračunati ψ_2, pa ψ_3 itd. Nulta i prva vrijednost valne funkcije odabiru se proizvoljno, a i logično je za diferencijalnu jednadžbu drugog reda da ovisi o dvije vrijednosti (analogno početnim uvjetima). Za ψ_0 i ψ_1 odaberemo jako male brojeve,vrlo blizu 0.

Rubni uvjeti su još jedan važan dio rješavanja. Oni ograničavaju valnu funkciju ili njenu derivaciju, primjerice uvjet za harmonički oscilator glasi

$$\psi(-\infty) = \psi(+\infty) = 0, \tag{33}$$

tj. valna jednadžba u beskonačnosti mora iščezavati.

3.2 Algoritam

Osnovna ideja algoritma je, kao što je natuknuto u uvodu u poglavlje, diskretizirati prostor, u ovom slučaju x-os, te onda svakoj točki diskretizacije pridijeliti neku vrijednost koja aproksimira vrijednost valne funkcije. Uz pomoć literature ([1]) konstruiran je sljedeći algoritam, uz određene izmjene i redukcije originala budući da je bio namijenjen za rješavanje drugog kvantnog problema, potencijalne jame. Algoritam je, dakle, prilagodljiv, promjenom početnih i rubnih uvjeta može se primijeniti na više slučajeva.

Tako razvijeni algoritam koristimo za rješavanje slučaja protona u harmoničkom potencijalu $V(x) = \frac{m\omega^2x^2}{2}$ s kutnom frekvencijom $\omega = 5.34 \cdot 10^{21}s^{-1}$. Lako je prilagoditi algoritam promjenom konstanti, mase ili frekvencije.

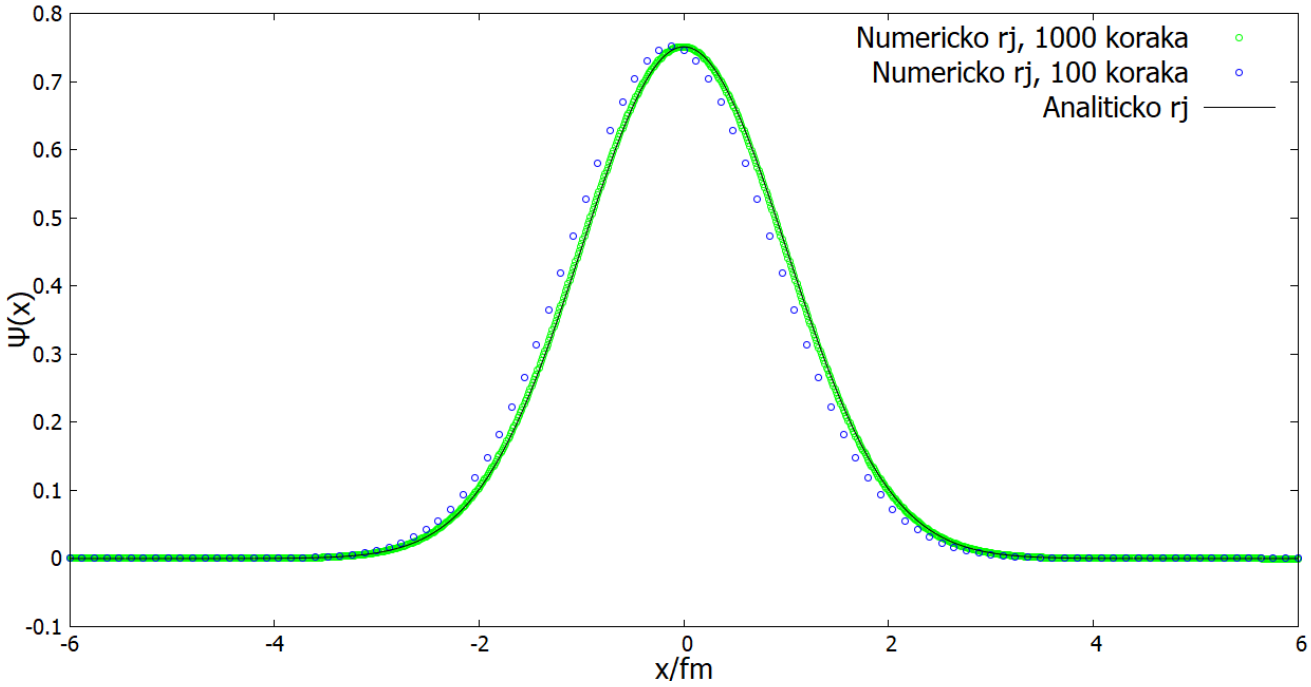
Algoritam je strukturiran kroz nekoliko ključnih koraka:

- Definiramo preciznost računanja te broj svojstvenih stanja koje želimo odrediti
- Vrijednosti reducirane Planckove konstante, mase čestice, frekvencije uvrštavaju se na samom kraju, tj. tad se rješenja skaliraju, a na početku su sve ove konstante jednake 1.Tada je energija osnovnog stanja $E_0 = (0 + 0.5)\hbar\omega = 0.5$

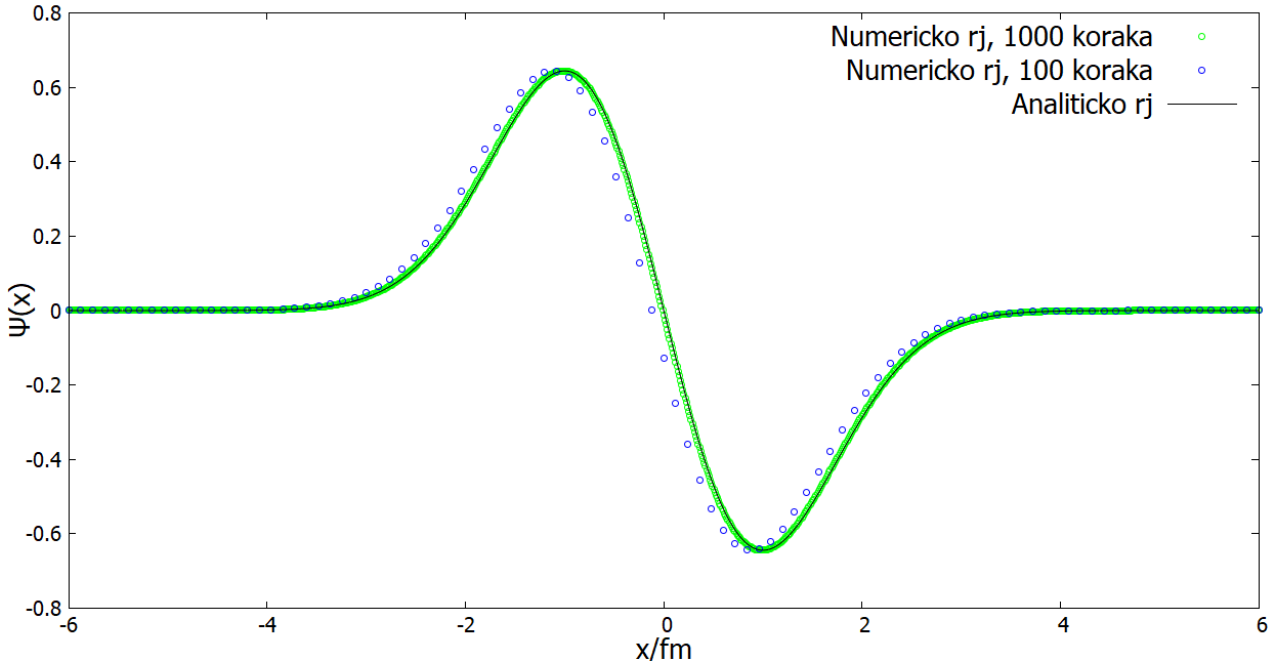
- Ne možemo programirati beskonačnost, pa odredimo x_{min} i x_{max} za koje je valna funkcija jako blizu 0. Točke obrata računamo kao $\pm\sqrt{2E_n/m\omega^2}$, što u ovom konkretnom problemu iznosi ± 0.966, pa je dovoljno odabrati plus i minus 6 kao "beskonačnosti", jer su dovoljno daleko od točaka obrata.
- Idući je potez odabiranje koraka h_0. Računamo ga kao 12(raspon x-osi, od -6 do 6) podijeljeno sa nekim brojem po želji. Što veći broj podjela napravimo na x-osi, to će rješenja biti i preciznija. Zato je ovo krucijalni parametar metode, u ovisnosti o kojem ćemo i grafički vidjeti razliku efikasnosti metode. Primjerice, podijelit ćemo x-os na N=100, 1000, 10000 komada od -6 do 6, pa korak iznosi $12/N$.
- Postavimo nultu i prvu vrijednost valne funkcije na jako male brojeve, npr. 10^{-3} i $2 \cdot 10^{-3}$
- Vrtimo glavnu petlju onoliko puta koliko svojstvenih vrijednosti i stanja želimo odrediti. Svaki put Numerovljevom formulom računamo vrijednosti valne funkcije duž cijelog raspona x-osi, te tražimo svojstvene vrijednosti energije
- Na početku odaberemo neku probnu vrijednost energije, a kako je skoro nemoguće očekivati da iz prvog pokušaja pogodimo svojstvenu vrijednost, korigiramo u petlji gdje kroz svaku iteraciju dolazimo do sve preciznije vrijednosti dok ne dođemo do svojstvene vrijednosti za energiju. Pokušavamo namjestiti energiju tako da valna funkcija iznosi 0. Ako dobijemo pozitivnu vrijednost, smanjimo probnu energiju, a ako dobijemo negativnu, povećamo probnu energiju, dok ne dođemo do dovoljno dobre vrijednosti unutar granica odabrane preciznosti s početka algoritma.
- Računamo koeficijent normalizacije funkcije te ispisujemo normalizirane vrijednosti u datoteku
- Vraćamo prave vrijednosti konstanti koje smo na početku postavili na 1, te skaliramo pronađene energije množenjem s dobivenim koeficijentom skaliranja. Ispisujemo energije u MeV

3.3 Grafički prikaz rezultata

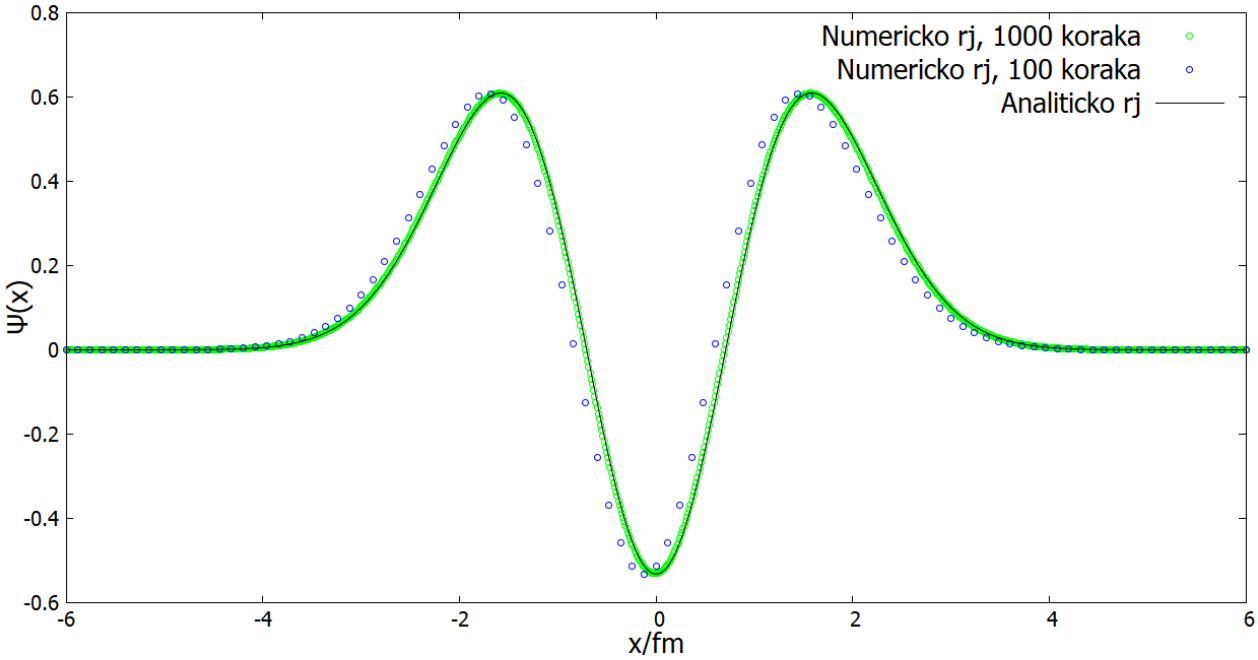
Nakon izvršenja koda, datoteke u koje se spremaju rezultati numeričkog rješenja poslužit će za vizualni prikaz u programskom paketu Gnuplot. Iznimno je korisno vidjeti koliko su rezultati precizni, odnosno u kakvom su slaganju s analitičkim rješenjem. Kao što je spomenuto, bit će prikazano kako preciznost ovisi o odabranom parametru broja podjela x-osi, odnosno posljednično, odabranom koraku h_0.



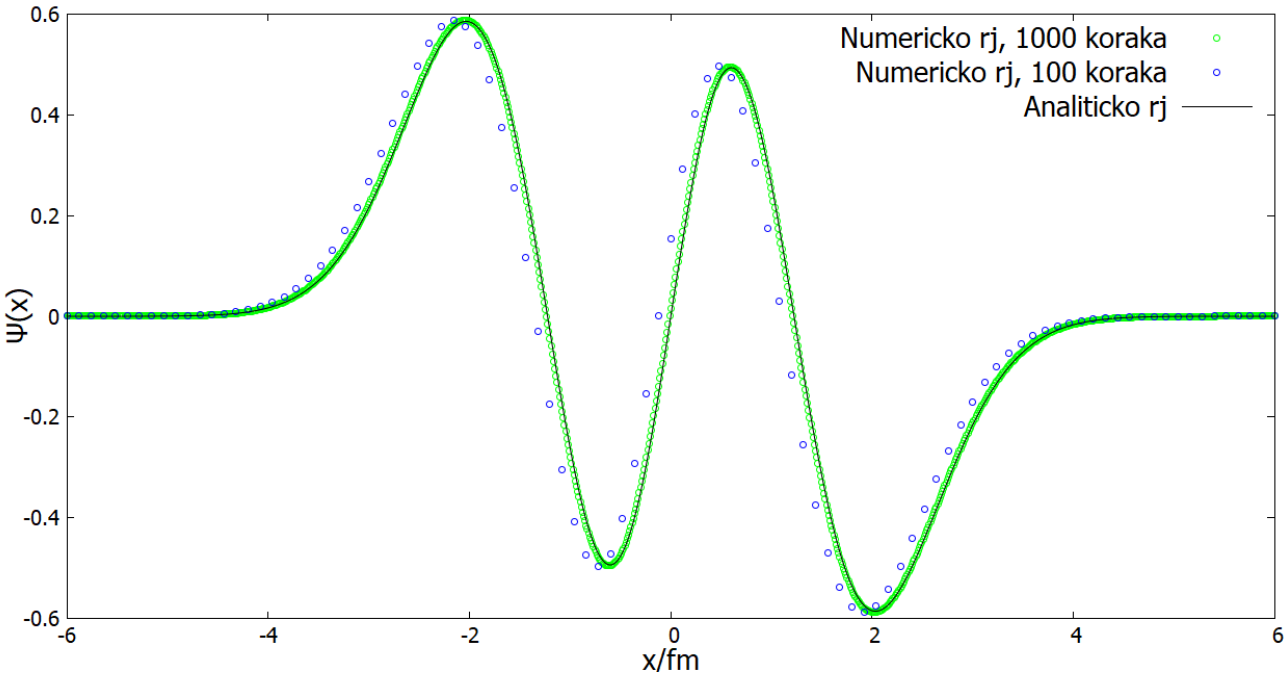
Slika 2. *Osnovno kvantno stanje, usporedba analitičkog rješenja s numeričkim za 100 i 1000 koraka podjele*



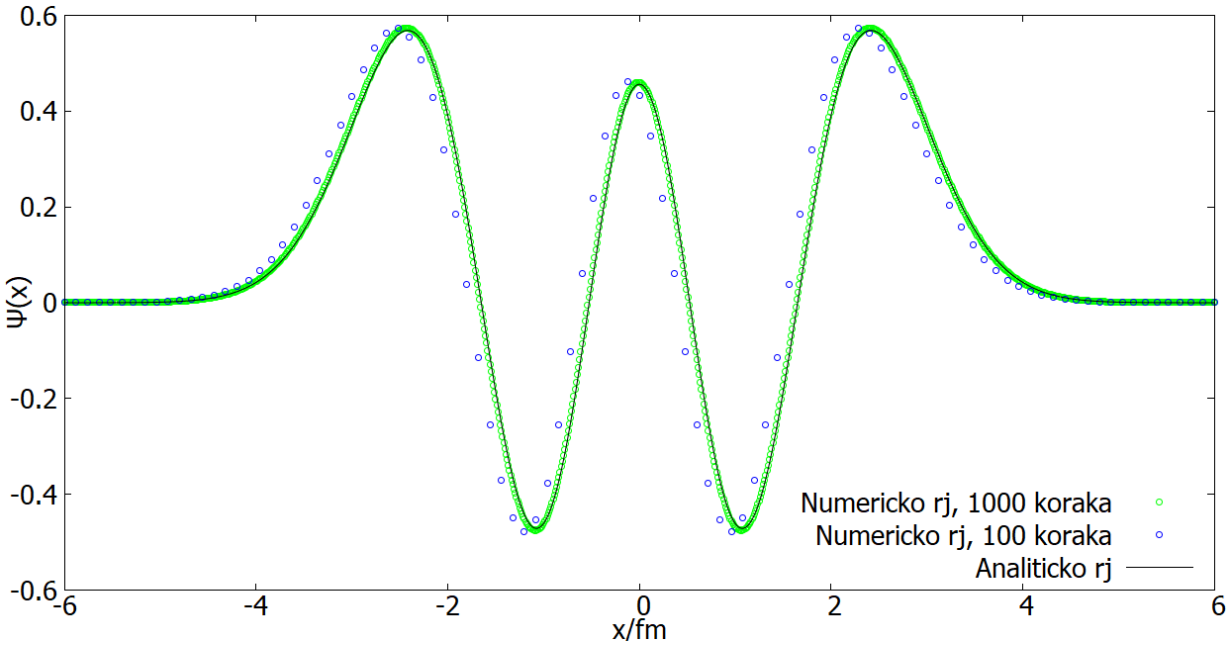
Slika 3. *Prvo pobuđeno kvantno stanje, usporedba analitičkog rješenja s numeričkim za 100 i 1000 koraka podjele*



Slika 4. *Drugo pobuđeno kvantno stanje, usporedba analitičkog rješenja s numeričkim za 100 i 1000 koraka podjele*



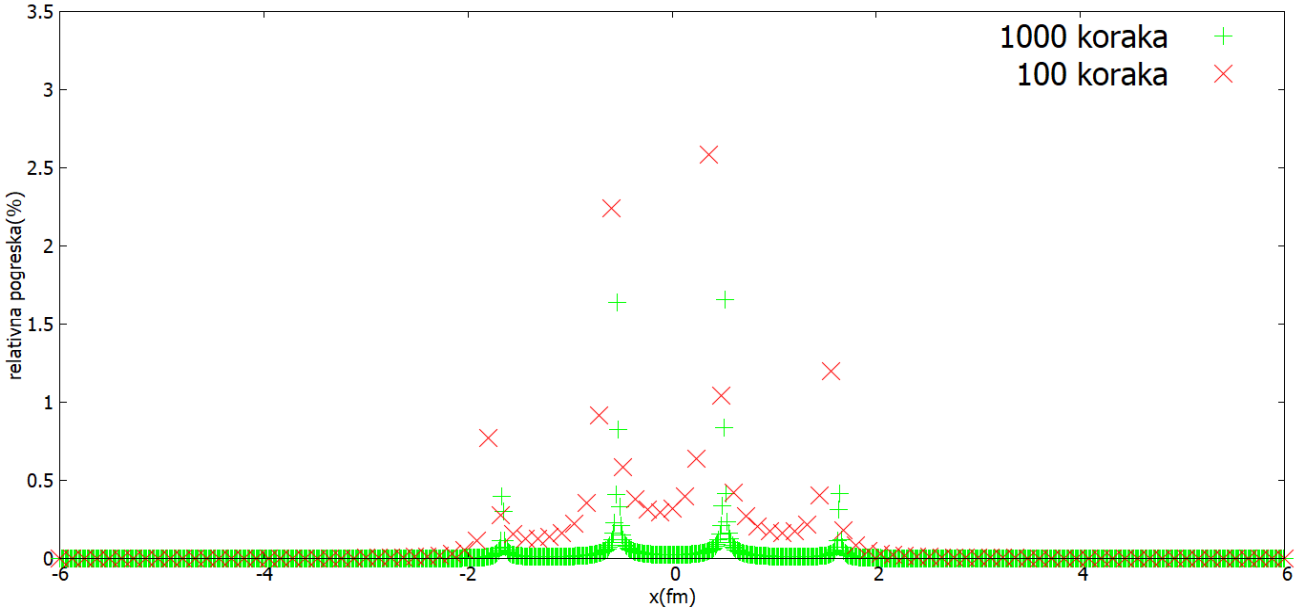
Slika 5. *Treće pobuđeno kvantno stanje, usporedba analitičkog rješenja s numeričkim za 100 i 1000 koraka podjele*



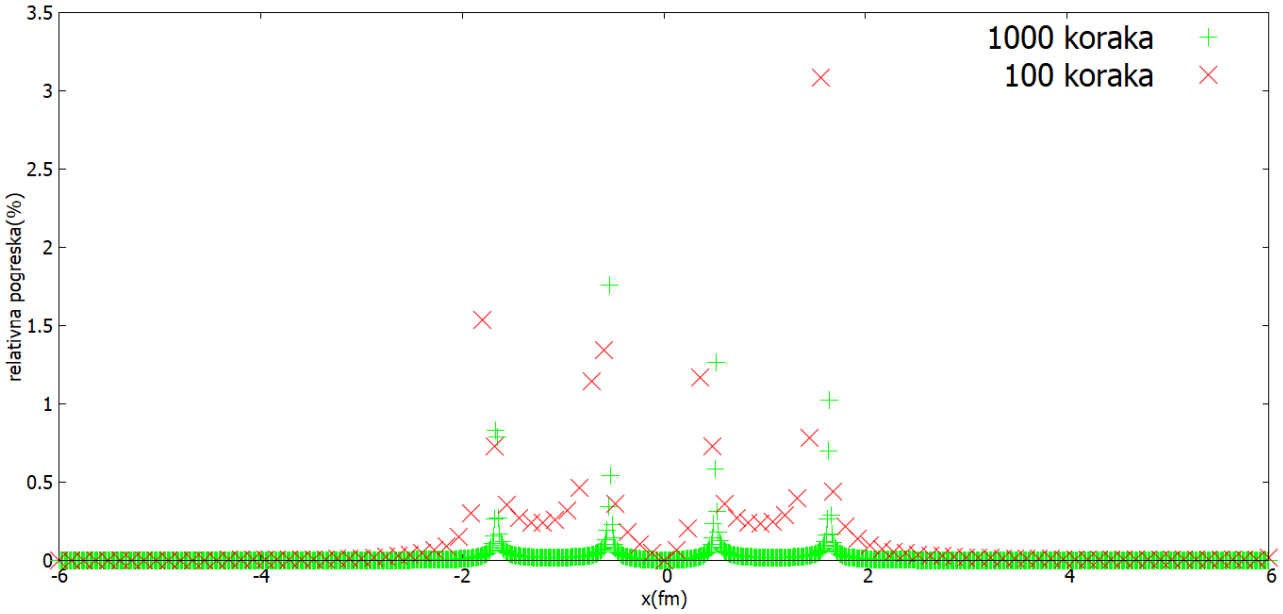
Slika 6. *Četvrto pobuđeno kvantno stanje, usporedba analitičkog rješenja s numeričkim za 100 i 1000 koraka podjele*

Razlika u preciznosti rješenja vidljiva je golim okom. Već sa 1000 koraka podjele vidimo da je preciznost metode iznimno dobra, izvrsno se poklapa s analitičkim rješenjem, iako ni za drugu podjelu ne možemo reći da je jako neprecizna, štoviše, ni tada pogreška nije prevelika. Ipak, za preciznije izračune poželjno je odabrati podjelu označenu zelenim kružićima, iako zahtijeva malo duže izvršavanje samog koda. Razlika u trajanju izvršavanja iznosila je nekoliko sekundi, a to nije neko značajno čekanje, pa se isplati podijeliti os na više dijelova. Za duže, kompliciranije numeričke izračune važno je pronaći ravnotežu između preciznosti i vremena izvršavanja.

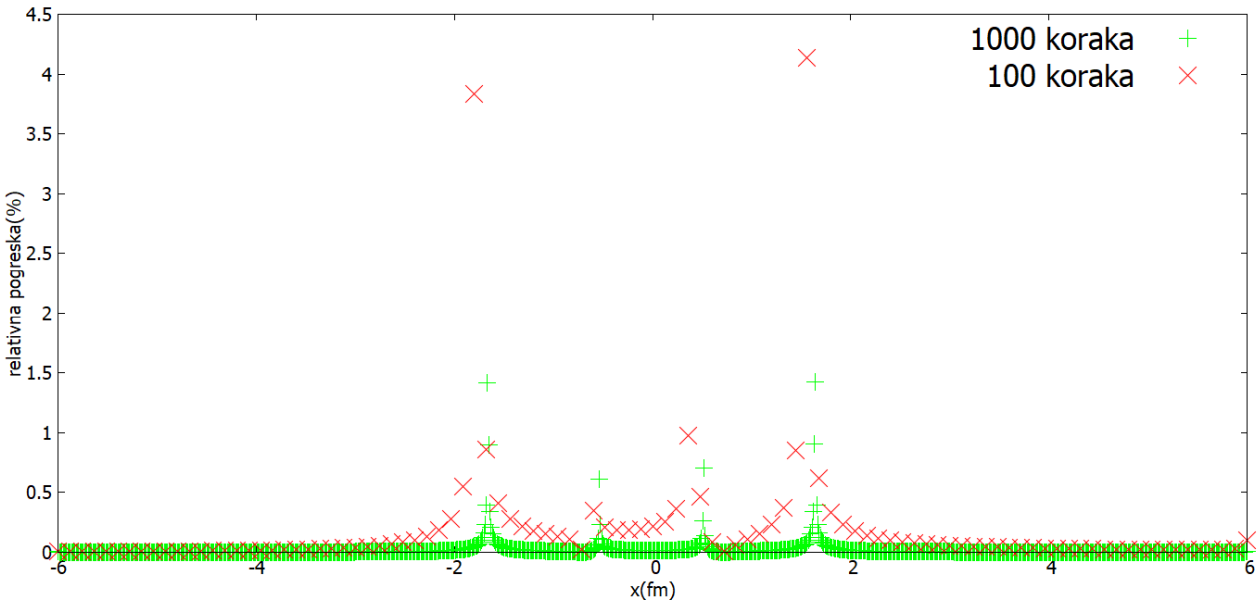
Još jedan način vizualizacije kako veći broj koraka podjele vodi preciznijem rješenju je graf relativne pogreške. Na y-osi prikazana je relativna pogreška izražena u postocima. Kad to učinimo za svako stanje pojedinačno, dobivamo grafove prikazane na slikama 7-11.



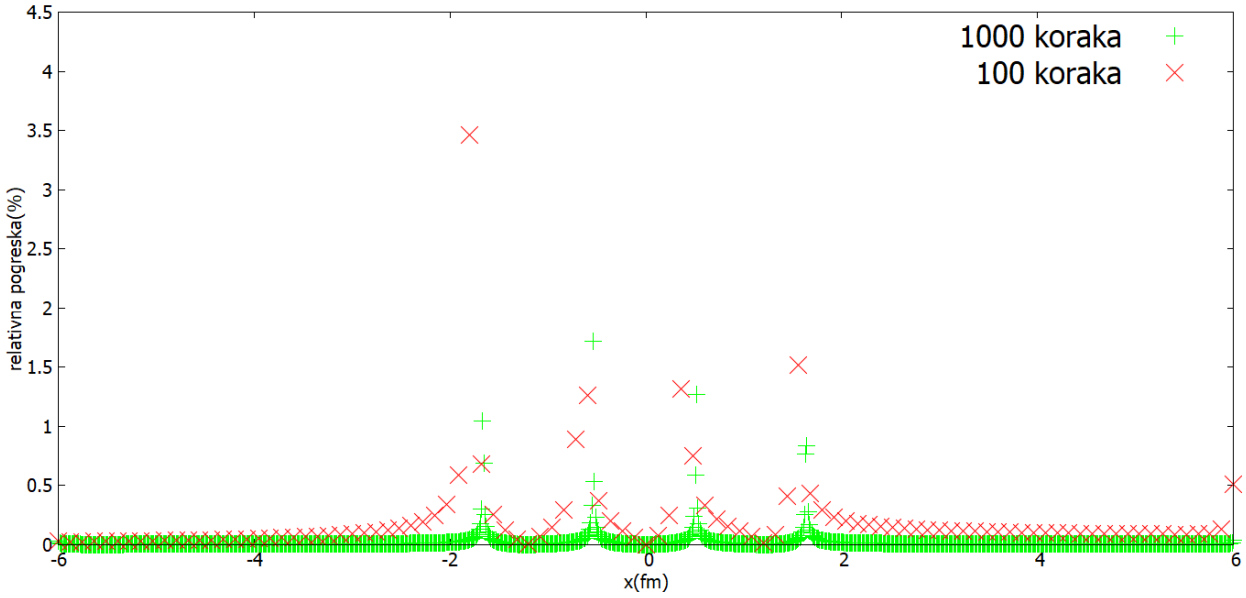
Slika 7. *Usporedba relativne pogreške numeričkog rješenja za 100 i 1000 koraka za osnovno stanje*



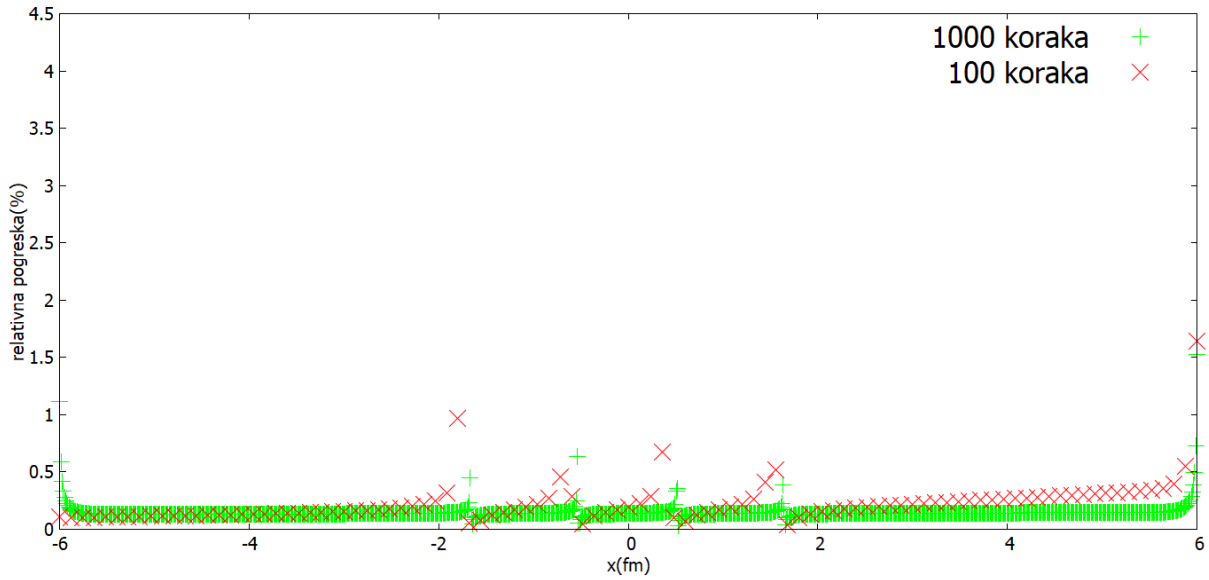
Slika 8. *Usporedba relativne pogreške numeričkog rješenja za 100 i 1000 koraka za prvo pobuđeno stanje*



Slika 9. *Usporedba relativne pogreške numeričkog rješenja za 100 i 1000 koraka za drugo pobuđeno stanje*



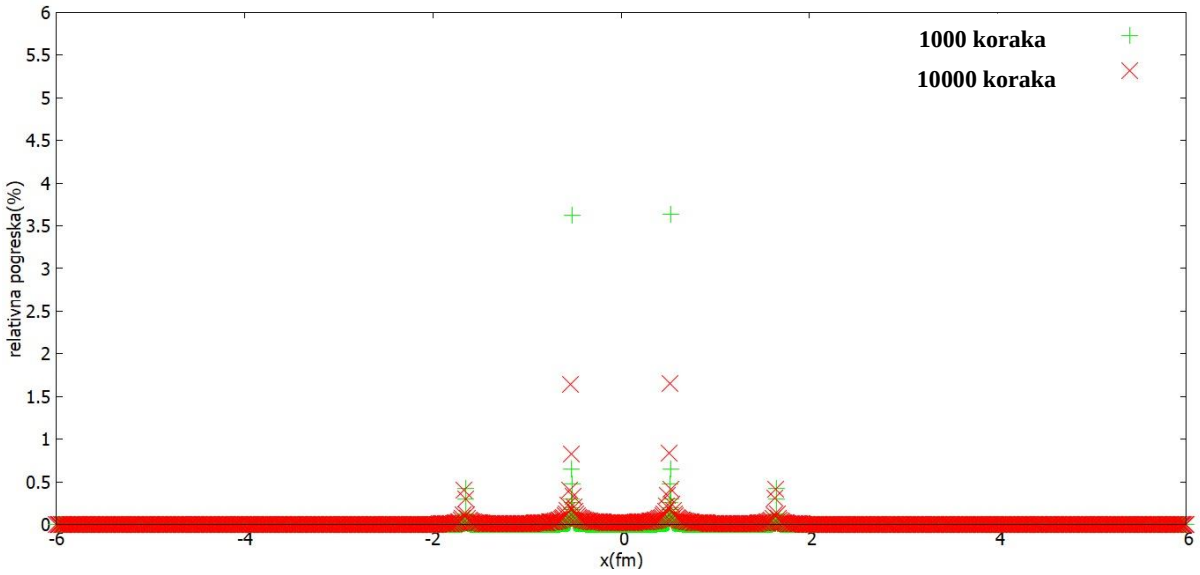
Slika 10. *Usporedba relativne pogreške numeričkog rješenja za 100 i 1000 koraka za treće pobuđeno stanje*



Slika 11. *Usporedba relativne pogreške numeričkog rješenja za 100 i 1000 koraka za četvrto pobuđeno stanje*

Povećanjem koraka podjele najviše se na preciznosti dobija na mjestima gdje valna funkcija ima veće vrijednosti, što ima smisla budući da su tu derivacije najveće pa manji korak više doprinosi preciznosti.

Treba napomenuti da je metoda sa 1000 koraka podjele dala jako precizne rezultate, nema potrebe prikazivati i rezultat sa 10000 koraka. Nakon izvršenja koda i vizualizacije, zaključio sam da nema nikakve primjetne razlike između 1000 i 10000 koraka, a graf bude teže čitljiv i prezgusnut. Iz tog razloga sam zaključio da je već ovaj rezultat dovoljno dobar. Kako bi provjerio ovu tezu nacrtao sam relativnu pogrešku za osnovno stanje za 1000 i 10000 koraka i to je prikazano na slici 12. Naravno, postoji mali napredak za 10000, ali 1000 koraka daje gotovo identičnu pogrešku, takva je podjela zanemarivo malo nepreciznija.



Slika 12. *Usporedba relativne pogreške numeričkog rješenja za 1000 i 10000 koraka za osnovno stanje*

Iako su rješenja u cijelom spektru gotovo identična, oko $x = \pm 1$ je rješenje s deset tisuća koraka duplo preciznije (greška od 1.5% naspram 3%). Kod korištenja numeričke metode računanja valja imati na umu kolika je pogreška prihvatljiva. Primjerice, ako je u nekom eksperimentu preciznost mjerenja neke vrijednosti 5%, onda je dovoljno primijeniti metodu s tisuću koraka, ali ako zahtijevamo veću preciznost, manju od 2%, onda pogreška metode s tisuću koraka nije zanemariva te je potrebno unaprjeđenje na deset tisuća.

Preostaje pogledati daje li metoda točna rješenja za svojstvene vrijednosti energije. Analitički, prilično je jednostavno doći do svojstvenih energija:

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \approx 3.5\left(n + \frac{1}{2}\right) MeV \tag{34}$$

Tablica 1. *Svojstvene vrijednosti energije za prvih 5 svojstvenih stanja dobivene analitički i numerički. Numerička vrijednost u tablici dobivena je metodom s tisuću koraka.*

n	$E_n^{analitički}(MeV)$	$E_n^{numerički}(MeV)$
0	1.750000000000	1.749999999795
1	5.250000000000	5.249999998112
2	8.750000000000	8.749999992829
3	12.25000000000	12.24999998232
4	15.75000000000	15.74999996759

4 Zaključak

U ovom završnom radu opisana je vremenski neovisna Schrodingerova jednadžba i njeno rješavanje, analitičko i numeričko, u jednoj dimenziji. Cilj rada je ispitati može li se i kako Schrodingerova jednadžba precizno riješiti numerički. Razmatran je slučaj čestice koja oscilira u harmonijskom potencijalu, a razlog za to je vrlo velika raširenost modela harmonijskog oscilatora u raznim granama fizike. Nakon uvoda u temu i kratkog pregleda konteksta nastanka jednadžbe, objašnjeno je kako se analitički jednadžba rješava za jednostavan slučaj slobodne čestice, a zatim i malo napredniji slučaj, harmonijski oscilator. Numerička metoda i algoritam rješavanja objašnjeni su u nastavku rada, a čitatelji mogu sami reproducirati rezultate, koji su na kraju grafički prikazani, tj. uspoređeni s analitičkim uz pojašnjenje o razini preciznosti metode. Konačni rezultat je da metoda daje izvrsna poklapanja s analitičkim rješenjem te je cilj ispunjen. Smatram da je ovaj rad dobar za početnike u numeričkom računanju i kvantnoj mehanici, kako bi se upoznali s načinima rješavanja jedne od najvažnijih jednadžbi u fizici. Ovaj rad daje mali uvid u moćan svijet računarske fizike. Možda nam za rješavanje ovakvih, jednostavnijih primjera nije uvijek nužna pomoć računala, ali zanimljivo je na njima pokazati da računala imaju veliki potencijal i sposobnost izrazito precizno riješiti i naprednije probleme. Algoritam opisan u radu dokazano je uspješno riješio analitički rješiv zadatak, ali može ga se prilagoditi i pokušati iskoristiti na kompliciranim slučajevima koji nemaju analitičko rješenje. U tome leži glavna snaga numeričkog rješavanja problema, uzevši u obzir da jako mali postotak fizikalnih problema uopće ima analitičko rješenje.

5 Literatura

[1] *Nouredine Zettili, Quantum Mechanics Concepts and Applications, John Wiley & Sons, Ltd, Jacksonville State University, Jacksonville, USA, 2009.*
[2] *Wikipedia, URL: https://hr.wikipedia.org/wiki/Kvantna_mehanika, 8.9.2020.*