

Egyrészecske sajátenergiáinak meghatározása az időfüggetlen
Schrödinger-egyenlet megoldásával, MatLab-ban

Wacha András

2007. június 19.

Kivonat

Ez a dolgozat egy használati utasítás a MatLab programozása c. tantárgy házi feladatához. A feladat az idő-független, egyrészecske-Schrödinger-egyenlet numerikus megoldása volt. A megoldást egydimenzióban végeztük el, véges differencia-módszerrel.

1. fejezet

Elméleti háttér

A kvantummechanika alapvető jelentőségű egyenlete az időfüggetlen, egyrészecske Schrödinger-egyenlet:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1.1)$$

ahol $\psi(\mathbf{r})$ az úgynevezett hullámfüggvény, mely reguláris (folytonos, egyértékű, véges értékű). Ennek a pontonkénti abszolútérték-négyzete adja a megtalálhatósági valószínűség-sűrűség függvényt, mely szemléletesen azt jelenti, hogy a tér adott pontjában a részecske milyen valószínűséggel található meg.

Valószínűség-számításból tudjuk, hogy egy sűrűségfüggvény integrálja az egész téren 1-et kell, hogy adjon. Azt is észrevehetjük, hogy a Schrödinger-egyenlet egy megoldásának bármely számszorosa is megoldása, azaz $\psi(\mathbf{r})$ és $c\psi(\mathbf{r})$ ekvivalensek: ugyanazt a megtalálhatósági valószínűséget írják le. Minden ekvivalenciareláció osztályfelbontást indukál az adott halmazon. Könnyen látható, hogy mik lesznek itt az ekvivalenciaosztályok.

Minden osztályt egy elemével reprezentáljunk, méghozzá azzal, amelyiknél az abszolútérték-négyzet függvény integrálja 1.

A Schrödinger-egyenlet többi paraméteréről nem beszéltünk még. \hbar a Dirac-állandó, mely a h Planck-állandónak 2π -ed része. m a részecske tömege, $V(\mathbf{r})$ a potenciálfüggvény, mely a helytől függ, E pedig az úgynevezett energia-sajátérték (vegyük észre: a Schrödinger-egyenlet sajátérték-egyenlet alakú).

A házi feladatomban erre a problémára írtam programot, méghozzá az egydimenziós speciális esetére. Ebben az esetben a Schrödinger-egyenlet mátrix-sajátértékegyenletté alakítható a következő módon.

Legyen a potenciál adva N ekvidisztáns pontban: $V = [V_1 V_2 V_3 \dots V_N]^T$. A ψ függvényt egy $[a, b]$ intervallumon keressük, illetve annak (a határokat is beleértve) pontosan N pontján. Ezen az N darab ponton legyen definiálva a potenciál.

A Schrödinger-egyenlet első tagjához szükséges második deriválást a következőképpen végezzük el az i -edik pontban:

$$\psi''(x_i) \approx \frac{\frac{\psi(x_{i+1}) - \psi(x_i)}{h} - \frac{\psi(x_i) - \psi(x_{i-1}))}{h}}{h} = \frac{1}{h^2} (\psi(x_{i+1}) + \psi(x_{i-1}) - 2\psi(x_i)) \quad (1.2)$$

ahol h az osztásköz.

Ha 0-ra kötött határfeltételeket vizsgálunk ($\psi(a-h) = \psi(b+h) = 0$), akkor a fenti, diszkrétizált második deriválás operátora úgy hat a ψ függvényre, mint ahogyan a $\psi = [\psi(x_1) \psi(x_2) \dots \psi(x_N)]^T$ vektorra hat a következő mátrix:

$$\nabla_d = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -2 \end{bmatrix} \quad (1.3)$$

A Schrödinger-mátrix tehát a következő lesz:

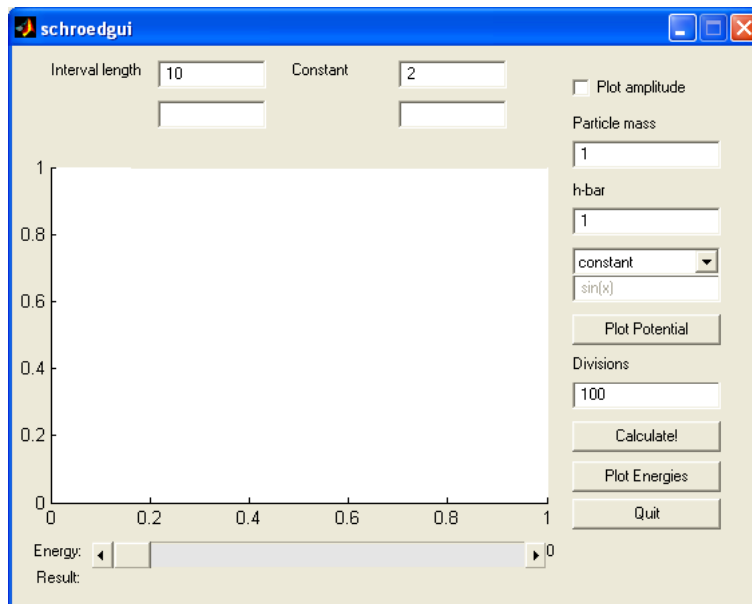
$$\mathbf{S} = -\frac{\hbar^2}{2m\hbar^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & -2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} V_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & V_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_4 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & V_N \end{bmatrix} \quad (1.4)$$

Ennek a sajátértékproblémája pedig már megoldható a MatLab `eigs` függvényével.

2. fejezet

A program kezelése

A programot futtatva a 2.1. ábrán látható képernyőt látjuk.



2.1. ábra. A program induló képernyője

A különböző felületi elemeket és funkciójukat a következőkben tisztázzuk.

2.1. Grafikon

Ezen a grafikonon jelennek meg a különböző görbék: a ψ vagy $|\psi|^2$ függvények, illetve az energiaszintek grafikonja.

2.2. Plot amplitude

Ha ez a jelölődoboz be van jelölve, akkor a számolás után a grafikon a ψ hullámfüggvényt fogja rajzolni. Ha nincs bejelölve, akkor $|\psi|^2$ -t.

2.3. Particle mass

A részecske tömegét jelenti. Itt érdemes pár szót ejteni a program által használt mértékegységekről.

A dimenziók pontos használata teljesen a felhasználó feladata és szabadsága. Ha a felhasználó konzekvensen használja a mennyiségeket, a program tetszőleges mértékegységrendszerben képes számolni. Tehát ha SI-ben dolgozunk, a h -bar értéke $1,054571628 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$, atomi mértékegységrendszerben pedig természetesen 1. Megadhatjuk $eV \cdot s$ -ban is: $6,58211899 \cdot 10^{-16} \text{ eVs}$. Van választási szabadságunk a tömeg dimenziójában is: lehet kg , g , eV . . . Ugyanígy a különböző hosszúságok megadásánál is kiválaszthatunk *egy* mértékegységet. A potenciál, energia dimenziójú mennyiségeknél is úgy kell megadni, hogy korrekt legyen.

2.4. h -bar

Ez a Dirac-állandó ($\hbar = \frac{h}{2\pi}$). Ugyan fizikailag állandó, de a különböző mértékegységrendszerekben különböző az értéke, ezért itt megadható.

2.5. Potenciáltípus választó

Ez a legördülő menü néhány potenciált tartalmaz. Minden potenciálfajtának van néhány paramétere, melyek az ablak tetejénél levő maximum négy szerkesztődobozban adhatóak meg (e szerkesztődobozok közül mindig annyi aktív, amennyire éppen szükség van). A szerkesztődobozokra a következőkben par<i>-vel fogunk hivatkozni, ahol a számozás a következő séma szerint történik:

1 2
3 4

A potenciálok a következők lehetnek:

2.5.1. Konstans (constant)

Konstans potenciál egy adott intervallumon (par1), adott értékkel (par2).

2.5.2. Ugrás (step)

Heaviside-szerű véges ugrás az adott intervallumon ([0,par1]), az intervallum adott pontjában (par2), adott magasságra (par3).

2.5.3. Potenciálfal (wall)

A [0,par1] intervallum par2 pontjában par3 magasságú, par4 széles derékszögű potenciálfal.

2.5.4. Harmonic oscillator

A [-par1, par1] intervallumon, par2 körfrekvenciájú harmonikus oszcillátor-potenciál.

2.5.5. Megadott függvény (function)

Ha a legördülő menüből ezt az opciót választjuk, akkor a menü alatti szövegdobozba beírhatjuk azt a MatLab függvényt, amely előállítja a potenciált (fontos, hogy x-függő legyen! Ha konstans potenciált szeretnénk, akkor $0*x+c$ -t írjunk!)

2.6. Plot Potential

A gombot megnyomva a potenciálfüggvényt rajzolja ki a program.

2.7. Divisions

Ez jelenti az osztásközök számát. Érdemes 100-tól kis lépésekben növelni. 1000-ig nem érdemes fölvenni, mert nagyon megugrik a futási idő.

2.8. Calculate!

E gomb megnyomásával kezdetét veszi a Schrödinger egyenlet megoldása. Bármely hiba esetén a „Result:” címkénél jelenik meg a hiba oka.

2.9. Energia-gördítősáv

Ha már kiszámoltuk a megoldást, ezzel a sávval lehet léptetni a különböző sajátfüggvények között. A sáv jobb szélén pedig az éppen ábrázolt sajátfüggvényhez tartozó energiát mutatja.

2.10. Plot Energies

Ez a gomb kirajzolja az energiaspektrumot, azaz az energiákat sorrendben, egymás után.

2.11. Quit

Kilépés a programból.

3. fejezet

Egy speciális eset

3.1. Részecske 1D potenciáldobozban

Tekintsünk egy m tömegű részecskét, mely végtelen potenciálfalak közé van bezárva, az $[a, b]$ intervallumon, konstans potenciál mellett. Azaz a potenciálfüggvény:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{ha } x < a \\ V & \text{ha } a \leq x \leq b \\ \infty & \text{ha } b < x \end{cases} \quad (3.1)$$

A hullámfüggvényt úgy tudjuk csak folytonossá tenni, ha a peremfeltételeket $\psi(a) = \psi(b) = 0$ -ként adjuk meg. Az (1.1) Schrödinger-egyenlet ezért a következő alakot fogja fölvenni (feltéve, hogy az $[a, b]$ intervallumon vagyunk):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi = (E - V)\psi \quad (3.2)$$

A Schrödinger-egyenlet megoldásakor (mivel állandó-együtthatós egyenlettel van dolgunk) a $\psi(x) = e^{\lambda x}$ próbafüggvényt alkalmazzuk. Ezt behelyettesítve a legutóbbi egyenletbe, kapjuk:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 \psi = (E - V)\psi \quad (3.3)$$

Ennek minden x helyen teljesülnie kell, azaz a ψ függvény mindkét oldali együtthatójának ugyanannak kell lennie. Ebből adódik, hogy $\lambda = \pm i \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$. Emiatt az egyenlet megoldása a $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ alakban keresendő, ahol $k = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$. Az A és B paramétereket a peremértékfeltételekből, valamint a normálási feltételből határozhatjuk meg.

Trigonometriai megfontolásokból levezethető, hogy

Alkalmazzuk az $a = 0$, $b = L$ megkötést! Ekkor a $\psi(0) = 0$ peremfeltétel az $A + B = 0$ összefüggést adja. Ekkor a $\psi(x)$ függvény a $\psi(x) = 2Ai \sin(kx)$ alakot ölti.

A második peremfeltétel:

$$2Ai \sin(kL) = 0 \quad (3.4)$$

Ezt az egyenletet k -ra rendezve kapjuk: $k = \frac{n\pi}{L}$ ahol n egész szám. Emlékezzünk most k definíciójára. Megoldva azt E -re megkapjuk a végtelen potenciálfalak közé zárt egyrészecske energiaspektrumát:

$$E = V + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (3.5)$$

Azaz a részecske csak diszkrét energiaértékeket vehet föl, s az energiaszintek n^2 szerint mennek.

Tehát az ezt a peremfeltételt kielégítő hullámfüggvény alakja:

$$\psi(x) = 2Ai \sin \frac{n\pi}{L} x \quad (3.6)$$

¹Ha $E - V$ véletlenül negatív volna, úgy a gyök egy i -t hozna be, így rendben volna minden

A normálási feltételből ($\int_0^L |\psi(x)|^2 dx = 1$) a következő egyenlet jön ki:

$$2|A|^2 \left(\frac{L}{2} - \frac{\sin(2\pi n)}{4} \right) = 1 \quad (3.7)$$

azaz

$$2|A|^2 \left(\frac{L}{2} \right) = 1 \quad (3.8)$$

Nyilván az A állandó értékében van egy fázisfaktornyi szabadságunk, ezért vegyük föl A -t úgy, hogy teljesítse a normálási feltételt, valamint $\psi(x)$ valós értékű legyen. Ekkor:

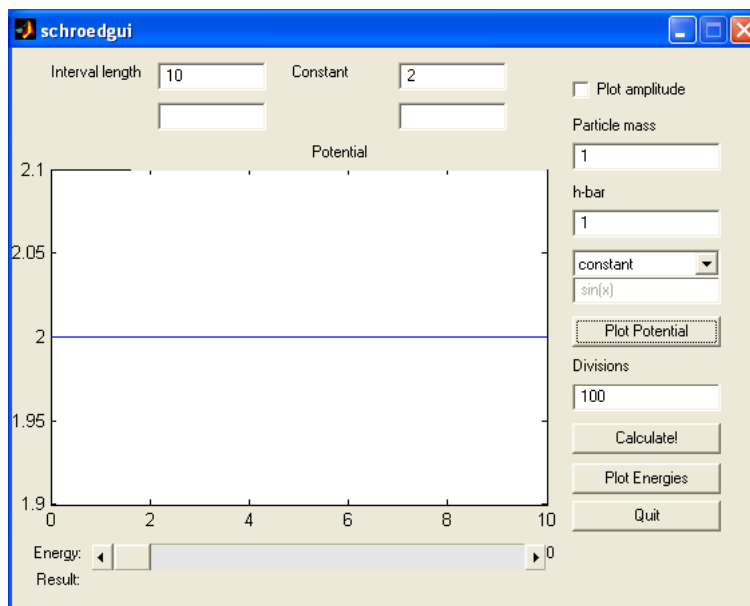
$$A = -i\sqrt{\frac{1}{L}} \quad (3.9)$$

Így a hullámfüggvény végleges alakja:

$$\underline{\underline{\psi(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x}} \quad (3.10)$$

Hasonlítsuk össze ezt az eredményt a MATLAB program által adott megoldással. A MATLAB alapesetben nem képes szimbolikus számításokra, ezért az alapvető paramétereket meg kell adnunk. Ebben a példában a $\hbar = 1$, $m = 1$, $L = 10$, $V = 2$ értékeket használtuk.

A potenciál a 3.1. ábrán látható.



3.1. ábra. Konstans potenciál

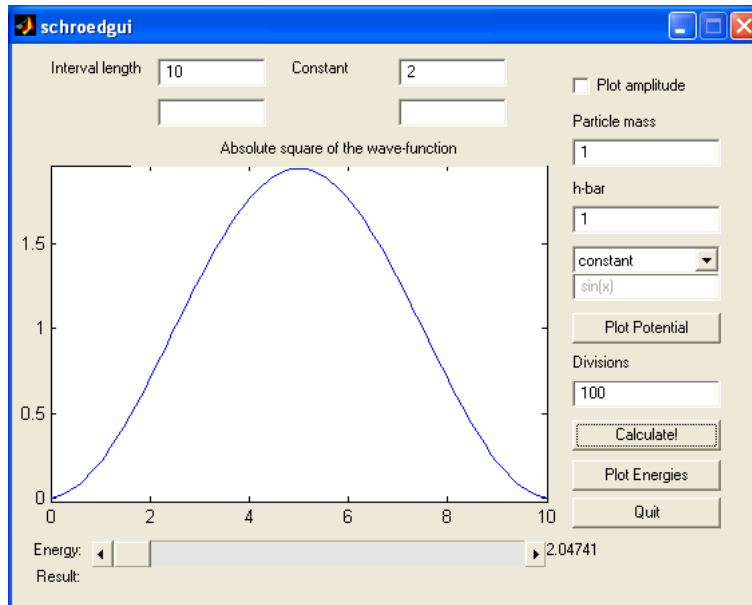
Ha megnyomjuk a **Calculate!** feliratú gombot, a program kiszámolja az összes energia-sajátértéket és a hozzájuk tartozó hullámfüggvény-sajátvektorokat. A számolás eredményét (a legelső energiához tartozó sajátvektort) a 3.2. ábra mutatja.

Ez a görbe a megtalálhatósági valószínűség sűrűségfüggvénye. Ha magára az amplitúdóra vagyunk kíváncsiak, a **Plot amplitude** jelölődoboz beikszelésével kaphatjuk (3.3. ábra).

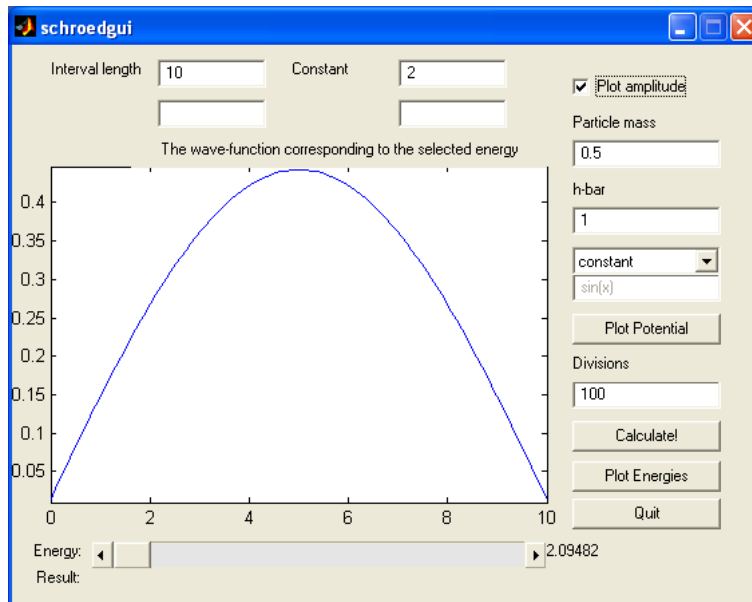
Van lehetőség természetesen a különböző energiasajátértékek és a hozzájuk tartozó sajátállapotok közötti lépkedésre. Ezt teszi lehetővé az ablak alján található görgetősáv, mellette pedig az energia értékét mutatja a felirat.

Az energiaspektrum is ábrázolható, mint azt jelen esetben a 3.4. ábra mutatja.

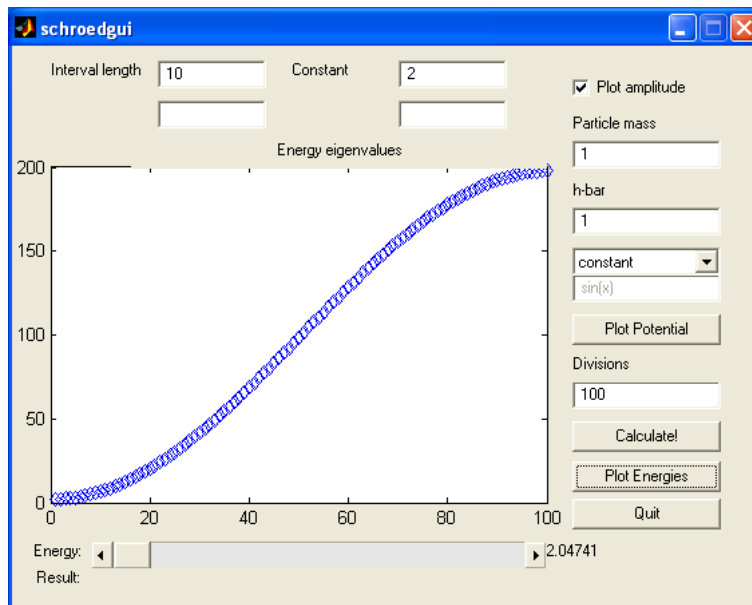
Természetesen nem csak ezekkel a potenciálokkal lehet dolgozni. A többi lehetőség kipróbálását – hely és idő hiányában – az olvasóra bízunk...



3.2. ábra. A számolás eredménye



3.3. ábra. Az amplitúdó



3.4. ábra. Energia-sajátértékek