**21. ročník, úloha IV . S ... *kvantový harmonický oscilátor*** *(7 bodů; průměr 3,20; řešilo 5 studentů)*

*Modelujte časový vývoj vlnové funkce částice, kterou umístíme do potenciálu $V(x) = kx^2/2$ a která je v čase $\tau = 0$ popsána vlnovou funkcí*

$$\psi_R(X, 0) = \exp\left(-\frac{(X - X_0)^2}{4}\right),$$
$$\psi_I(X, 0) = 0.$$

*Jedná se tedy o vlnový balík se středem mimo počátek. Prozradíme vám, že jde o tzv. koherentní stav harmonického oscilátoru a vlnový balík by měl harmonicky kmitat kolem počátku s úhlovou frekvencí $\sqrt{k/m}$ stejně jako klasická částice.*

*Pokud se vám toto podaří namodelovat, můžete vyzkoušet, jak se budou chovat vlnové balíky o jiné šířce (tedy se jmenovatelem v exponenciále odlišným od čtyř), případně jak bude situace vypadat při jiném průběhu potenciálu.* *Zadal autor seriálu Marek Pechal.*

Máme za úkol řešit soustavu dvou parciálních diferenciálních rovnic

$$\frac{\partial \psi_R(X,\tau)}{\partial \tau} = -\frac{\partial^2 \psi_I(X,\tau)}{\partial X^2} + \frac{1}{4}X^2\psi_I(X,\tau),$$
$$\frac{\partial \psi_I(X,\tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 \psi_R(X,\tau)}{\partial X^2} - \frac{1}{4}X^2\psi_R(X,\tau)$$

pro reálnou a imaginární část vlnové funkce $\psi(X,\tau)$, která závisí na bezrozměrné souřadnici $X$ a čase $\tau$. Počáteční podmínky jsou dány vztahy

$$\psi_R(X, 0) = \exp\left(-\frac{(X - X_0)^2}{4}\right),$$
$$\psi_I(X, 0) = 0.$$

Nepřítomnost okrajových podmínek nás nemusí znepokojovat, protože ty jsou zastoupeny podmínkou normalizovatelnosti vlnové funkce – zjednodušeně řečeno musí vlnová funkce pro $X \to \pm\infty$ klesat k nule. Stačí tedy zvolit meze $a$ a $-a$ dostatečně[1] vzdálené od počátku, ve kterých položíme umělou okrajovou podmínku $\psi(\pm a) = 0$.

Rovnici dále diskretizujeme v proměnné $X$, tj. rozdělíme interval $(-a, a)$ na $2N + 1$ uzlových bodů ekvidistantně rozmístěných ve vzdálenostech $a/N$. Hodnoty vlnové funkce v těchto bodech označíme $\psi^{(j)}(\tau) = \psi(aj/N, \tau)$, kde $j \in \{-N, -N+1, \ldots, N\}$. Z okrajových podmínek pak plyne $\psi^{(-N)}(\tau) = \psi^{(N)}(\tau) = 0$. Druhou parciální derivaci podle $X$ v bodě $X = aj/N$ pak zapíšeme pomocí její diskrétní aproximace

$$\frac{\psi^{(j-1)}(\tau) - 2\psi^{(j)}(\tau) + \psi^{(j+1)}(\tau)}{(a/N)^2}.$$

[1] To znamená takové, že hodnota vlnové funkce v bodech $\pm a$ je zanedbatelná proti hodnotám v okolí počátku.

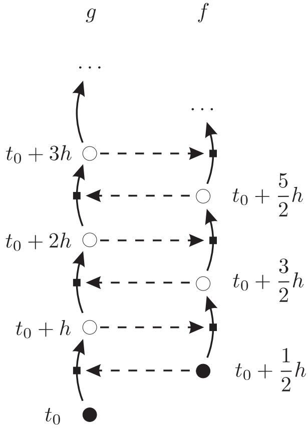
Z naší soustavy dvou parciálních diferenciálních rovnic tak dostaneme soustavu $4N-2$ obyčejných diferenciálních rovnic (ODR)

$$\frac{\mathrm{d}\psi_R^{(j)}(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = -\left(\frac{N}{a}\right)^2 (\psi_I^{(j-1)}(\tau) - 2\psi_I^{(j)}(\tau) + \psi_I^{(j+1)}(\tau)) + \frac{1}{4}\left(\frac{aj}{N}\right)^2 \psi_I^{(j)}(\tau)\,,$$
$$\frac{\mathrm{d}\psi_I^{(j)}(\tau)}{\mathrm{d}\tau} = \left(\frac{N}{a}\right)^2 (\psi_R^{(j-1)}(\tau) - 2\psi_R^{(j)}(\tau) + \psi_R^{(j+1)}(\tau)) - \frac{1}{4}\left(\frac{aj}{N}\right)^2 \psi_R^{(j)}(\tau)\,,$$

kde $j \in \{-N+1, \dots, N-1\}$.

Tuto soustavu ODR prvního řádu bychom v principu mohli řešit například některou z Runge-Kuttových metod. My zde však popíšeme jednoduchou metodu[2], která elegantně využívá speciálního tvaru této soustavy. Můžeme si totiž všimnout, že lze neznámé funkce rozdělit do dvou takových skupin (označme je $A$ a $B$), že časové derivace funkcí ze skupiny $A$ závisí jen na hodnotách funkcí ze skupiny $B$ a naopak (v našem případě jsou těmito skupinami funkce $\psi_R^{(j)}(\tau)$ a $\psi_I^{(j)}(\tau)$).

Při integraci takové soustavy ODR je obzvláště výhodné počítat hodnoty funkcí ze skupiny $A$ v časech $t_0$, $t_0+h$, $t_0+2h, \dots$, zatímco hodnoty funkcí ze skupiny $B$ v mezilehlých časech $t_0+h/2$, $t_0+3h/2$, $t_0+5h/2, \dots$ Potom totiž můžeme k počítání hodnot v každém dalším čase využít symetrickou aproximaci první derivace. Máme-li například soustavu dvou rovnic



Obr. 1. Ilustrace řešení soustavy ODR

$$\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t} = F(g(t),t)\,,$$
$$\frac{\mathrm{d}g(t)}{\mathrm{d}t} = G(f(t),t)\,,$$

plynou z aproximací $\mathrm{d}f(t)/\,\mathrm{d}t \approx (f(t+h/2) - f(t-h/2))/h$ a $\mathrm{d}g(t)/\,\mathrm{d}t \approx (g(t+h/2) - g(t-h/2))/h$ vztahy

$$f\left(t_0 + \left(j+\tfrac{1}{2}\right)h\right) = f\left(t_0 + \left(j-\tfrac{1}{2}\right)h\right) + hF\left(g\left(t_0+jh\right), t_0+jh\right)\,,$$
$$g\left(t_0+(j+1)\,h\right) = g\left(t_0+jh\right) + hG\left(f\left(t_0+\left(j+\tfrac{1}{2}\right)h\right), t_0+\left(j+\tfrac{1}{2}\right)h\right)\,.$$

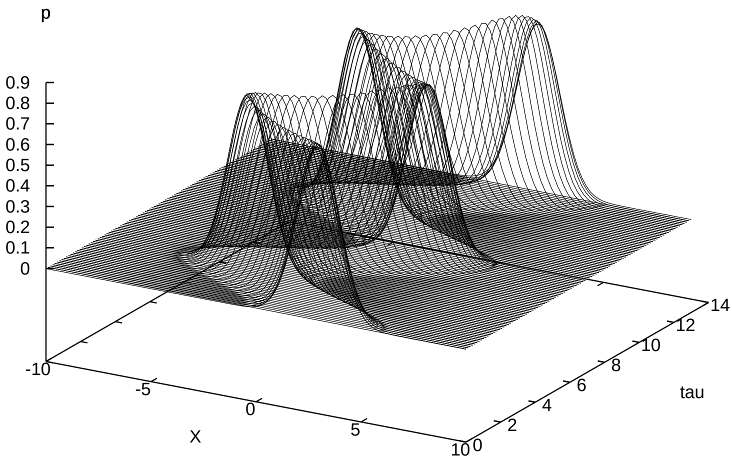
Pokud tedy na počátku známe hodnotu funkce $f$ v bodě $t_0+h/2$ a $g$ v $t_0$, můžeme ihned pomocí druhého z předchozích dvou vztahů vypočítat hodnotu $g$ v $t_0+h$, dále pomocí prvního vztahu $f$ v $t_0+3h/2$ a tak dále (viz obrázek 1) až do hodnoty $t$, kterou potřebujeme.

Tento postup snadno zobecníme i na naši původní soustavu ODR. Jedinou komplikací, která nás dělí od napsání programu pro řešení Schrödingerovy rovnice, je to, že známe počáteční podmínky pro $\psi_R^{(j)}(\tau)$ i $\psi_I^{(j)}(\tau)$ ve stejném čase a ne v časech navzájem posunutých o $h/2$, jak

[2]) Tato metoda je pěkně popsána i v prvním dílu *Feynmanových přednášek z fyziky* nebo v chytré knize *Computational Physics* od R. H. Landaua a M. J. Páeze.

vyžaduje výše popsaný algoritmus. To ovšem jednoduše vyřešíme jediným počátečním krokem o $h/2$ s použitím *asymetrické* aproximace první derivace.

Nakonec ještě využijeme další trik, podle kterého získáme přesnější hodnotu hustoty pravděpodobnosti, pokud místo $\psi_R^2(t) + \psi_I^2(t)$ budeme počítat $\psi_R^2(t) + \psi_I(t - h/2)\psi_I(t + h/2)$.




Obr. 2. Závislost hustoty pravděpodobnosti na poloze a čase pro částice v koherentním stavu harmonického oscilátoru.

Klíčové části kódu pak mohou vypadat například takto ...

```
hx:= a/N;
// predvypocet pocatecni hodnoty pI - krok zpet o h/2
for j:= -N+1 to N-1 do
  pI[j][0] := pI[j][0] - h / 2 * ((pR[j - 1][0] +
              pR[j + 1][0] - 2 * pR[j][0])/sqr(hx) -
              pR[j][0] * sqr(hx * j) / 4);

// reseni rovnice
for k := 0 to maxk - 1 do
  // vypocet hodnot pR a pI v nasledujicim case
  for j := -N + 1 to N - 1 do begin
    pI[j][k + 1] := pI[j][k] + h * ((pR[j - 1][k] + pR[j + 1][k] - 2 * pR[j][k])
                    / sqr(hx) - pR[j][k] * sqr(hx * j) / 4);
    pR[j][k + 1] := pR[j][k] - h*((pI[j - 1][k] + pI[j + 1][k] - 2 * pI[j][k])
                    / sqr(hx) - pI[j][k] * sqr(hx * j) / 4);
  end;
```

```
// vypocet hustoty pravdepodobnosti
for k:= 0 to maxk -1 do
  for j := -N + 1 to N - 1 do
    p[j][k] := sqr(pR[j][k]) + pR[j][k] * pR[j][k + 1];
...
```

V tomto programu obsahuje pole `pR[j][k]` hodnoty $\psi_R^{(j)}(\tau_0 + kh)$, pole `pI[j][k]` pak hodnoty $\psi_I^{(j)}(\tau_0 + (k-1/2)h)$. Počáteční hodnoty v čase $\tau_0$ jsou na začátku uloženy v `pR[j][0]` a `pI[j][0]`. V poli `p[j][k]` je na konci výpočtu uložena hustota pravděpodobnosti v bodech $X = aj/N$ a časech $\tau = \tau_0 + kh$.

Pokud si výše popsaný program napíšete (nebo stáhnete z našich webových stránek) a budete s ním chvíli experimentovat, zjistíte, že použitý algoritmus bohužel není stabilní. K tomu, abychom mohli nasimulovat několik málo kmitů částice, je třeba použít poměrně dosti malý časový krok. Jinak se jakékoliv malé odchylky vlnové funkce (vzniklé například zaokrouhlováním) v průběhu výpočtu neúnosně zesílí a znehodnotí celý výsledek. Abychom tento efekt co nejvíce potlačili, je kromě volby dostatečně malého časového kroku nutné, aby počáteční vlnová funkce byla co nejhladší. Není proto příliš rozumné ji nastavit jednoduše jako $\exp(-(X - X_0)^2/4)$. Vzhledem k okrajové podmínce, která vyžaduje nulovost vlnové funkce v krajních bodech $X = \pm a$, by pak právě v krajních bodech měla vlnová funkce skok. Ten by při výpočtu způsobil vznik a šíření stále silnějších oscilací ve vypočtených hodnotách. Tento problém lze částečně vyřešit například použitím počáteční vlnové funkce $(1 - (X/a)^2) \exp(-(X - X_0)^2/4)$. Faktor $(1 - (X/a)^2)$ vhodně utlumí gaussovský člen v okrajových bodech a přitom jej téměř neovlivní v oblasti, kde je jeho hodnota nezanedbatelná.

V grafu na obrázku 2 jsme hustoty pravděpodobnosti získali položením $h = 10^{-4}$, $N = 50$, $a = 10$, $\tau_1 - \tau_0 = 14$, $X_0 = 3$.

***Marek Pechal***
`marek@fykos.mff.cuni.cz`

Fyzikální korespondenční seminář je organizován studenty UK MFF. Je zastřešen Oddělením pro vnější vztahy a propagaci UK MFF a podporován Ústavem teoretické fyziky UK MFF, jeho zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků.