Zápočtové úlohy z NTMF057

pro rok 2020/2021

Jednotlivé úlohy můžete řešit buď individuálně, přičemž si vyberete jednu z podúloh, nebo ve dvou či třech (podle počtu podúloh), kdy vždy jeden řeší jednu konkrétní podúlohu. Ovšem chce-li si někdo zkusit vyřešit sám více podúloh, tak samozřejmě může.

Poznámka k jednotkám: U úloh z kvantové mechaniky používám tzv. atomové jednotky, kde pokládáme $\hbar = 1$ a $m_e = 1$, takže všechny hmotnosti jsou měřeny relativně vůči hmotnosti elektronu. Jednotkou délky je pak Bohrův poloměr $a_0 \doteq 0{,}529177 \times 10^{-10}$ m, jednotkou energie je 1 hartree, který je roven dvojnásobku vazbové energie elektronu v základním stavu atomu vodíku, tedy přibližně 27,211 eV a jednotkou času $\tau_0 \doteq 2.418884 \times 10^{-17}\,\mathrm{s} \approx 1/40\,\mathrm{fs}$. Všechny rovnice a numerické hodnoty parametrů v těchto úlohách jsou vyjádřeny v atomových jednotkách a pro jednoduchost je explicitně neuvádím.

Úloha 1: vlastní energie pomocí WKB aproximace

(*řešení nelineární rovnice, Rombergova integrace, Gaussova kvadratura*)

V kvantové mechanice se ukazuje, že v rámci WKB aproximace se dají vázané stavy nalézt pomocí podmínky

$$\oint p(x)\mathrm{d}x = 2\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - V(x))}\,\mathrm{d}x = 2\pi(n + \tfrac{1}{2}), \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{1}$$

kde E je celková energie stavu, $V(x)$ je potenciální energie a m je hmotnost systému. Body x_1 a x_2 (tzv. body obratu) jsou body, v nichž nabývá integrand nulové hodnoty, tj. jde o kořeny rovnice

$$E - V(x) = 0\,. \tag{2}$$

Pro určité potenciály (harmonický oscilátor, Morseův potenciál) je možné body obratu určit analyticky. Též integrál

$$I(E) = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(E - V(x))}\,\mathrm{d}x \tag{3}$$

lze občas určit analyticky, ovšem obecně je nutné použít numerické metody.

Jednotlivé podprogramy můžete otestovat na harmonickém oscilátoru, $V(x) = m\omega^2/2$, pro který lze vše vyjádřit analyticky a kvantovací podmínka (1) platí přesně. Dále je využijte k řešení problému s Morseovým potenciálem

$$V(x) = V_0(\mathrm{e}^{-2\alpha(x-x_0)} - 2\mathrm{e}^{-\alpha(x-x_0)}), \tag{4}$$

který se používá pro přibližný popis vibračního pohybu jader v dvouatomových molekulách. I pro tento potenciál lze body obratu vyjádřit analyticky

$$x_{1,2} = x_0 + \frac{1}{\alpha}\ln\left[\frac{V_0}{E}\left(-1 \pm \sqrt{1 + \frac{E}{V_0}}\right)\right]\,.$$

Pokud chcete uvažovat obecnější potenciál, musíte napsat podprogram řešící (2) numericky.

1. Napište podprogram, který spočítá integrál (3) pomocí N-bodového lichoběžníkového pravidla I_N. Použijte jej k určení závislosti chyby $|I_N - I_\infty|$ na N pro $N = 2, 4, 8, ..., 1024$ a zobrazte závislost v log/log škále pro parametry $V_0 = 1$, $x_0 = 0$, $\alpha = 1$ a $m = 1$. Jako přesnou hodnotu (pro účely tohoto grafu) vezměte $I_\infty = I_{1024}$. Porovnejte tuto závislost s odhadem N^{-2} z Eulerovy-Maclaurinovy formule. Proč je závislost jiná? Najděte zkusmo správný odhad chyby $N^{-\alpha}$ a pokuste se zpřesnit výsledky pomocí Richardsonovy extrapolace
$$I_{2N}^{(1)} = \frac{2^\alpha I_{2N} - I_N}{2^\alpha - 1}.$$
Jaký je řád chyby α nového výsledku? Pokuste se zobecnit metodu Rombergovy integrace na tento případ. Najděte co nejpřesněji hodnotu $I(E = -0.5)$ a z integrálu pro E blízko nuly určete, kolik vázaných stavů kvantovací podmínka (1) předpovídá pro Morseův potenciál s parametry $V_0 = 1$, $x_0 = 0$ a $\alpha = 1$, pokud bude hmotnost $m = 1, 10, 100$.

2. Napište podprogram, který spočítá integrál (3) pomocí Gaussovy-Čebyševovy kvadratury. Nejdříve si uvědomte, že integrand se v krajních bodech x_1, x_2 chová (až na násobek konstantou) jako $\sqrt{x - x_1}$ a $\sqrt{x_2 - x}$ a má tedy v těchto bodech singulární derivaci. Singulární chování se napraví vynásobením výrazem $\sqrt{(x - x_1)(x_2 - x)}$. Proveďte lineární trasformaci $x \mapsto y$, která převede integrand na interval $\langle -1, 1\rangle$ a vypočtěte integrál pomocí Gaussovy-Čebyševovy kvadratury, tj.
$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)\sqrt{(x - x_1)(x_2 - x)}\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{(x - x_1)(x_2 - x)}} = \int_{-1}^{1} \tilde{f}(y)\frac{\mathrm{d}y}{\sqrt{1 - y^2}} = \sum_{i=1}^{N} \tilde{f}(y_i)w_i,$$
kde $\tilde{f}(y) = f(x(y))\sqrt{[x(y) - x_1][x_2 - x(y)]}$, váhy jsou $w_i = \pi/N$ a uzly
$$y_i = \cos\left(\frac{\pi(j - \frac{1}{2})}{N}\right).$$
Najděte co nejpřesněji hodnotu $I(E = -0.5)$ pro Morseův potenciál s parametry $V_0 = 1$, $x_0 = 0$ a $\alpha = 1$ a hmotnost $m = 1$. Integrálu pro E blízko nuly určete pro stejné parametry potenciálu, kolik vázaných stavů kvantovací podmínka (1) předpovídá, pokud je hmotnost $m = 1, 10, 100$.

3. Napište program, který nalezne energie všech vázaných stavů Morseova potenciálu s parametry $V_0 = 1$, $x_0 = 0$ a $\alpha = 1$ pro zadanou hmotnost m. K tomu využijte podprogram z podúkolu 1. nebo 2. a hledejte numericky energii vázaných stavů E_n jako řešení kvantovací podmínky (1) pro $n = 0, 1, \ldots, n_{max}$, kde n_{max} odhadněte z výpočtu integrálu pro $E = -\varepsilon$, kde ε je vhodné malé kladné číslo. Nalezené výsledky porovnejte s přesnými hodnotami
$$E_n = -\left(1 - \frac{n + \frac{1}{2}}{\sqrt{2m}}\right)^2, \quad 0 \le n \le \sqrt{2m} - \frac{1}{2}.$$
S jakou přesností dokážete tyto energie zreprodukovat?

Úloha 2: vlastní vázané stavy radiálního problému

(*numerické řešení ODR, problém vlastních čísel, interpolace*)

V kvantové mechanice lze určení vlastních stavů částice v centrálním poli zredukovat na řešení radiální Schrödingerovy rovnice

$$\left(-\frac{1}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{(l+1)l}{2mr^2}+V(r)\right)\psi(r)=E\psi(r)\,,\quad \psi(0)=0,\ \psi(r\to\infty)=0, \tag{5}$$

kde m je hmotnost částice, l moment hybnosti a $V(r)$ potenciální energie. Okrajové podmínky závisí na stavech, které nás zajímají a pro vázané stavy musí radiální vlnová funkce $\psi(r)$ splňovat $\psi(0)=0$ a $\psi(r\to\infty)=0$.

Pro několik potenciálů $V(r)$ lze tuto úlohu řešit analyticky. Pro účely testování vašich programů nalezněte vázané stavy pro potenciál

$$V(r)=-V_0\mathrm{e}^{-r/a} \tag{6}$$

a moment hybnosti $l=0$, kdy jsou vázané stavy s energií $E=-\kappa^2/2m$ dány podmínkou

$$J_{2a\kappa}(2a\sqrt{2mV_0})=0\,,$$

kde $J_z(x)$ je Besselova funkce, viz např. R. G. Newton: *Scattering Theory of Waves and Particles*, Dover 2002, kap. 14.3, str. 420. Konkrétně pro parametry $V_0=3$, $a=1$ a hmotnost $m=1$ byste měli dostat jediný vázaný stav s energií $E=-0.4114524802244$.

Poté řešte tutéž úlohu pro Morseův potenciál

$$V(x)=V_0(\mathrm{e}^{-2\alpha(r-r_0)}-2\mathrm{e}^{-\alpha(r-r_0)}) \tag{7}$$

s parametry $V_0=0.75102$, $\alpha=1.15350$ a $r_0=2.01943$, který v dobrém přiblížení popisuje potenciální energii pro vibrační pohyb molekuly dusíku N_2 v základním elektronickém stavu. Určete kolik vázaných vibračních stavů má tato molekula, je-li nerotující ($l=0$) a je-li její redukovaná hmotnost $m=12766.36$. Jak se tento počet stavů změní, pokud bude rotovat s momentem hybnosti $l=10$?

1. Napište program, který bude řešit výše uvedený problém pomocí tzv. metody střelby.

   Pokud bychom znali energii E, tak lze najít vlnovou funkci $\psi(r)$ převedením okrajové úlohy (5) na počáteční úlohu

$$\frac{\mathrm{d}\psi(r)}{\mathrm{d}r} = \pi(r) \tag{8}$$

$$\frac{\mathrm{d}\pi(r)}{\mathrm{d}r} = \left(\frac{(l+1)l}{r^2}+2mV(r)-2mE\right)\psi(r) \tag{9}$$

$$\psi(0) = 0, \tag{10}$$

$$\pi(0) = c, \tag{11}$$

   kde konstanta c může být v principu libovolná, protože jde pouze o změnu normalizace, ovšem v praxi je třeba volit rozumnou hodnotu, zvlášť pro vyšší l, kdy začínáme hluboko v klasicky zakázané oblasti a vlnová funkce může z počátku velmi rychle růst.

Protože však energii E dopředu neznáme, je nutné ji hledat podle asymptotického chování vlnové funkce v klasicky zakázané oblasti pro velká r. Pokud zvolená energie přesně neodpovídá vázanému stavu, dříve či později převládne exponenciálně rostoucí část řešení a vlnová funkce začne rychle růst, nebo klesat v závislosti na znaménku řešení. Pokud budeme energii zvyšovat tak, že projdeme některým s vázaných stavů, přibude do řešení další nulový bod a řešení pro velká r změní znaménko. To lze právě využít k tomu, abychom iteračně našli s rozumnou přesností energie vázaných stavů.

Jako numerickou metodu k integraci počáteční úlohy (8) použijte Rungeovu-Kuttovu metodu 2. nebo 4. řádu a ověřte nejprve např. na harmonickém oscilátoru, že se chyba řešení chová dle předpokladu, abyste si ověřili, že jste metodu naprogramovali správně.

2. Napište program, který bude řešit problém (5) převedením na problém vlastních čísel a vektorů reálné symetrické matice tak, že druhou derivaci aproximujete pomocí konečné diference
$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(r)}{\mathrm{d}r^2} \approx \frac{\psi(r_{i+1}) - 2\psi(r_i) + \psi(r_{i-1})}{h^2}$$
na rovnoměrném gridu s krokem h, tedy $r_i = r_0 + ih$, $i = 0, 1, \ldots, n$, přičemž body r_0 a r_n musí být zvoleny tak, aby vlnová funkce v nich byla buď nulová, nebo velmi malá, takže ji lze aproximovat nulou. Položením $\psi(r_0) = 0$ a $\psi(r_n) = 0$ pak dostanete tridiagonální symetrickou matici, jejíž vlastní čísla a vektory můžete nalézt pomoci Jacobiho metody.

   Na testovacím potenciálu (6), nebo harmonickém potenciálu studujte přesnost metody v závislosti na kroku h a volbě r_0 a r_n. Pak metodu aplikujte na úlohu s Morseovým potenciálem (7).

3. Napište podprogram (funkci), který bude interpolovat (např. po částech lineárně, nebo přirozenými kubickými splajny) potenciál V(r) zadaný v libovolných bodech $0 \leq r_1 < \ldots < r_n$. Na Morseově potenciálu (7) ověřte chování maximální chyby interpolace v závislosti na zvoleném kroku h rovnoměrného gridu. Tuto funkci použijte jako vstup do programu z podúlohy 1. nebo 2. a studujte vliv nepřesnosti interpolace na přesnost získaných vlastních stavů.

Úloha 3: klasická dynamika hmotných bodů

(*numerické řešení ODR*)

Uvažujme pohyb částice v poli centrální síly. Díky zachovávajícímu se momentu hybnosti lze její pohyb popsat v rovině např. pomocí Hamiltonových rovnic

$$\dot{p}_x = -\frac{\partial H}{\partial x}, \dot{p}_y = -\frac{\partial H}{\partial y}, \dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p_x}, \dot{y} = \frac{\partial H}{\partial p_y},$$

kde Hamiltonián je

$$H(x, y, p_x, p_y) = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + V(x, y)$$

a pro Keplerův problém je potenciál

$$V(x, y) = -\frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}}.$$

Napište program, který bude tento problém řešit Rungeovou-Kuttovou metodou 2. a 4. řádu. Ověřte správnost programu tím, že a) zkontrolujete splnění zákonů zachování (energie, tj. hodnoty hamiltoniánu a momentu hybnosti $L = xp_y - yp_x$), b) zkontrolujete, že se částice vrátí do stejného bodu po jedné periodě, a to s přesností danou řádem příslušné metody. Problém můžete testovat například pro počáteční podmínky

$$x = (1 - \epsilon),\ y = 0,\ p_x = 0,\ p_y = \sqrt{\frac{1 + \epsilon}{1 - \epsilon}},$$

pro něž dostaneme eliptickou dráhu s hlavní poloosou $a = 1$, periodou $T = 2\pi$, energií $E = -1/2$ a $L = \sqrt{1 - \epsilon^2}$, kde numerickou excentricitu $\epsilon = \sqrt{a^2 - b^2}/a$ (b je vedlejší poloosa) volte $0 < \epsilon \leq 1$.

(Pro zvídavé): Zobecněte tuto úlohu na problém pohybu 2 (případně více) těles v rovině (případně můžete i v prostoru). Konkrétně zkuste studovat pohyb Země a Měsíce okolo Slunce.

Úloha 4: časový vývoj jednorozměrného vlnového balíku

(*řešení soustavy lineárních rovnic, rychlá Fourierova transformace*)

Časový vývoj jednorozměrné vlnové funkce $\psi(x,t)$ lze v kvantové mechanice popsat opakovaným působením evolučního operátoru

$$\psi(x,t+\Delta t) = \mathrm{e}^{-iH\Delta t}\psi(x,t)\,, \qquad \psi(x,0) = \psi_0(x)\,, \tag{12}$$

kde Hamiltonián pro částici s hmotností μ v potenciálu $V(x)$ má tvar

$$H = -\frac{1}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\,. \tag{13}$$

Protože vyčíslení exponencíály operátoru nemusí být jednoduché, používají se různé aproximace, z nichž dvě jsou uvedeny v podúlohách.

V několika případech (volná částice, harmonický oscilátor, vlastní stav systému) lze časový vývoj spočítat analyticky. Programy pro časový vývoj tak můžete otestovat např. působením na určitý vlastní stav $\psi_n(x)$ systému s energií E_n, kdy časový vývoj je dán pouze triviálním násobením fázového faktoru

$$\psi(x,t) = \mathrm{e}^{-iE_n t}\psi_n(x)\,,$$

kde předpokládáme, že se v čase $t=0$ systém nachází ve vlastním stavu $\psi_n(x)$, případně na pohybu volného normalizovaného Gaussovského vlnového balíku

$$\psi(x,t=0) = (2\pi\sigma^2)^{-1/4}\mathrm{e}^{-(x-x_0)^2/4\sigma^2+ip_0(x-x_0)} \tag{14}$$

o střední poloze x_0, se střední hodnotou hybnosti p_0 a šířce σ_0, jehož přesný časový vývoj je dán vztahy

$$\psi(x,t) = (2\pi\Sigma(t)^2)^{-1/4}\mathrm{e}^{-(x-X(t))^2/4\Sigma(t)^2+i\phi(x,t)}\,, \tag{15}$$

kde

$$\Sigma(t)^2 = \sigma^2 + \frac{t^2}{4\mu^2\sigma^2}\,, \quad X(t) = x_0 + \frac{p_0 t}{\mu}\,,$$

a

$$\phi(x,t) = p_0[x-X(t)] + \frac{p_0^2 t}{2\mu} + \frac{t[x-X(t)]^2}{8\mu\sigma^2\Sigma(t)^2} + \mathrm{Arg}\left(\frac{1}{\sqrt{\mu + it/(2\sigma^2)}}\right)\,,$$

kde $\mathrm{Arg}(z)$ je funkce vracející fázi komplexní proměnné z.

1. Napište program, který bude řešit časový vývoj (12) pomocí Crankovy-Nicolsonové metody, kdy evoluční operátor aproximujeme Padého aproximantem [1/1]

$$\mathrm{e}^{-iH\Delta t} \approx \frac{1 - iH\Delta t/2}{1 + iH\Delta t/2}\,.$$

   Vlnové funkce a Hamiltonián přitom vyjádřete na rovnoměrném gridu $x_i = x_0 + ih$ pro $i = 0,\ldots,n$, přičemž x_0, h a n musí být vhodně zvoleny pro danou úlohu tak, aby po celou dobu časového vývoje bylo možné předpokládat, že $\psi(x_0) = \psi(x_n) = 0$. Druhou derivaci aproximujte pomocí konečné diference

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi(x)}{\mathrm{d}x^2} \approx \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1})}{h^2}\,,$$

čímž se z operátorů $1 \pm iH\Delta t/2$ stanou tridiaginální matice s potenciálem $V(x)$ přičteným na hlavní diagonále. Řešení jednoho časového kroku pak probíhá ve dvou krocích, nejprve násobíme tridiagonální maticí odpovídající působení

$$z(x) = (1 - iH\Delta t/2)\psi(x,t)$$

a pak řešíme soustavu lineárních rovnic s tridiagonální maticí odpovídající rovnici

$$(1 + iH\Delta t/2)\psi(x, t + \Delta t) = z(x)\,.$$

Metodu otestujte na výše uvedených analyticky řešitelných případech. Ověřte, že se chyba chová jako Δt^2 v čase. Poté ji aplikujte na pohyb Gaussovského vlnového balíku (14) v poli lineárního harmonického oscilátoru $V(x) = \mu\omega^2 x^2/2$. Určete periodu (tj. vzdálenost mezi maximy funkce $c(t) = \langle\psi(t)|\psi(0)\rangle$, jde o tzv. autokorelační funkci) jeho pohybu pro konkrétní volbu parametrů $\mu = 1$, $\omega = 1.5$, $x_0 = -5$, $p_0 = 0$ a $\sigma = 0.5$. Na jakých parametrech tato perioda závisí?

2. Napište program, který bude řešit časový vývoj (12) pomocí tzv. metody rozděleného propagátoru, kdy evoluční oparátor aproximujeme pomocí

$$\mathrm{e}^{-iH\Delta t} \approx \mathrm{e}^{-iV\Delta t/2}\mathrm{e}^{ip^2\Delta t/2m}\mathrm{e}^{-iV\Delta t/2}\,.$$

Vlnovou funkci vyjádřete na rovnoměrném gridu $x_i = x_0 + ih$ pro $i = 0, \ldots, n$, přičemž x_0, h a n musí být vhodně zvoleny pro danou úlohu tak, aby po celou dobu časového vývoje bylo možné předpokládat, že $\psi(x_0) = \psi(x_n) = 0$. Počet bodů volte tak, aby $n-1 = 2^k$ pro efektivní použití rychlé Fourierovy transformace, kterou použijte k přechodu do p reprezentace poté, co aplikujte na $\psi(x,t)$ operátor $\mathrm{e}^{-iV\Delta t/2}$ (násobení čísly $\mathrm{e}^{-iV(x_i)\Delta t/2}$), čímž redukujete působení operátoru $\mathrm{e}^{ip^2\Delta t/2m}$ opět na násobení, tentokrát v p-prostoru. Inverzní transformací pak opět přejděte do x-prostoru a proces opakujte. V této úloze nemusíte programovat FFT metodu, ale můžete využít některou z knihoven pro její výpočet.

Metodu otestujte na výše uvedených analyticky řešitelných případech. Ověřte, že se chyba chová jako Δt^2 v čase. Poté ji aplikujte na pohyb Gaussovského vlnového balíku (14) v poli lineárního harmonického oscilátoru. Určete periodu (tj. vzdálenost mezi maximy funkce $c(t) = \langle\psi(t)|\psi(0)\rangle$, jde o tzv. autokorelační funkci) jeho pohybu pro konkrétní volbu parametrů $\mu = 1$, $\omega = 1.5$, $x_0 = -5$, $p_0 = 0$ a $\sigma = 0.5$. Na jakých parametrech tato perioda závisí?