1. Wstęp

Na piątych zajęciach laboratoryjnych zajęliśmy się znalezieniem pięciu pierwszych funkcji falowych będących rozwiązaniami równania Schrödingera, czyli równania własnego operatora energii.

$$-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\psi(r) + V(r)\psi(r) = E\psi(r) \tag{1}$$

$V(r)$ − *energia potencjalna*
$\psi(r)$ − *funkcja falowa*
E − *energia odpowiadająca funkcji* $\psi(r)$

Szukaliśmy poziomów energii i funkcji falowych dla cząsteczki o masie m, umieszczonej w potencjale jednowymiarowego oscylatora harmonicznego, gdzie energia potencjalna takiego oscylatora to $V(x) = k\frac{x^2}{2}$, przyjmując jednostkę energii jako $h\omega$, *gdzie* $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, zaś jednostkę długości $\sqrt{\frac{h}{m\omega}}$, równanie (1) przyjmuje postać:

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

Zastępując drugą pochodną po lewej stronie powyższego równania, ilorazem różnicowym $\frac{d^2\psi}{dx^2}(x = x_i) \approx \frac{\psi(x_{i+1}) - \psi(x_i) + \psi(x_{i-1})}{(\Delta x)^2}$ równanie (2) dostajemy w postaci:

$$-\frac{\psi_{i+1} - \psi_i + \psi_{i-1}}{2(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}x_i^2\psi_i = E\psi_i \tag{3}$$

Żądając zerowania się funkcji na krańcach przedziału, czyli $\psi(L) = \psi(-L) = 0$, równanie (3) możemy zapisać w postaci macierzowej:

$$\begin{pmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_{2,1} & h_{2,2} & h_{2,3} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} & h_{3,4} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & & & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{N-3,N-4} & h_{N-3,N-3} & h_{N-3,N-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{N-2,N-3} & h_{N-2,N-2} & h_{N-2,N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & h_{N-1,N-2} & h_{N-1,N-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-3} \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-3} \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}$$

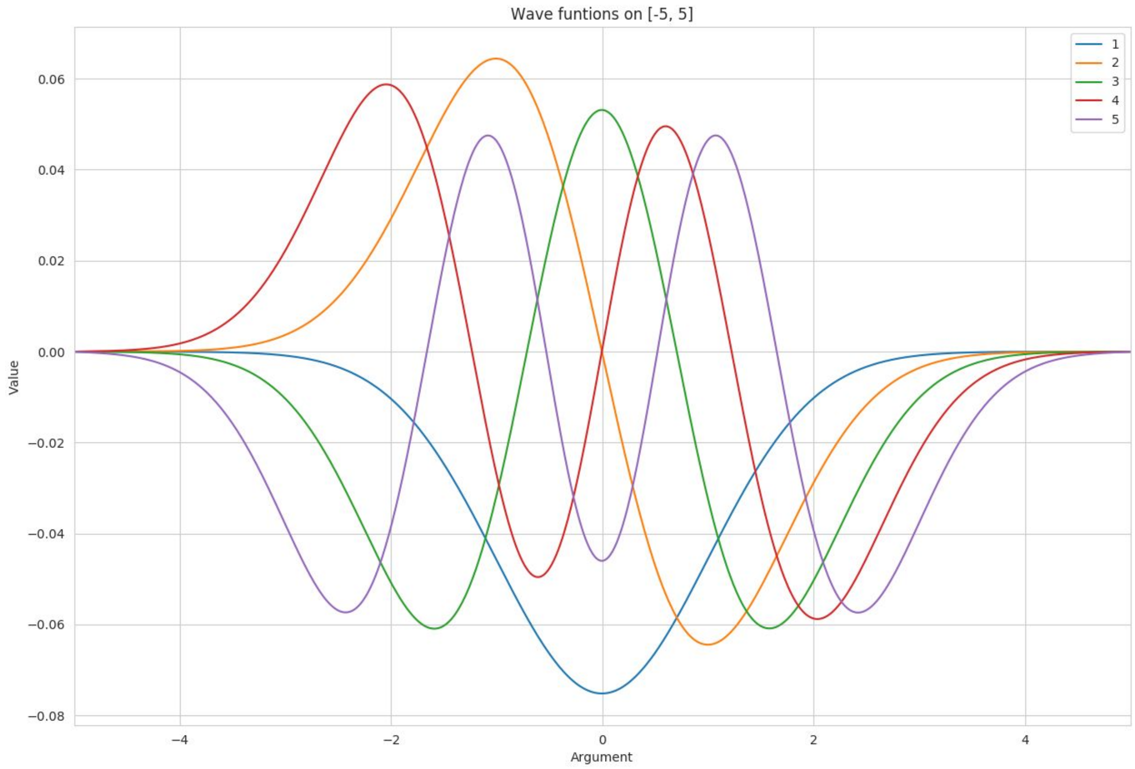
gdzie $h_{i,\,i-1} = h_{i-1,\,i} = -1/[2(\Delta x)^2]$, dla $i = 2 \ldots N$,

$h_{i,i} = (\Delta x)^{-2} + x_i^2/2,\ x_i = -L + i\Delta x$, dla $i = 1 \ldots N-1$,
oraz $\Delta x = 2L/N$.
Otrzymana macierz, jest macierzą rzeczywistą, symetryczną i trójprzekątniową. W następnym kroku należało obliczyć jej wektory i wartości własne.

W celu wyznaczenia wspomnianych wyżej wektorów i wartości własnych i posiadając równanie w postaci takiej macierzy, postanowiłem użyć funkcji **tqli** znajdującej się w bibliotece Numerical Recipes. Potrzebowaliśmy pięciu najmniejszych wartości i wektorów własnych, stąd użyłem funkcji **eigsrt**,(także z Numerical Recipes), która jest funkcją sortującą wektory i wartości własne.

2. Wyniki

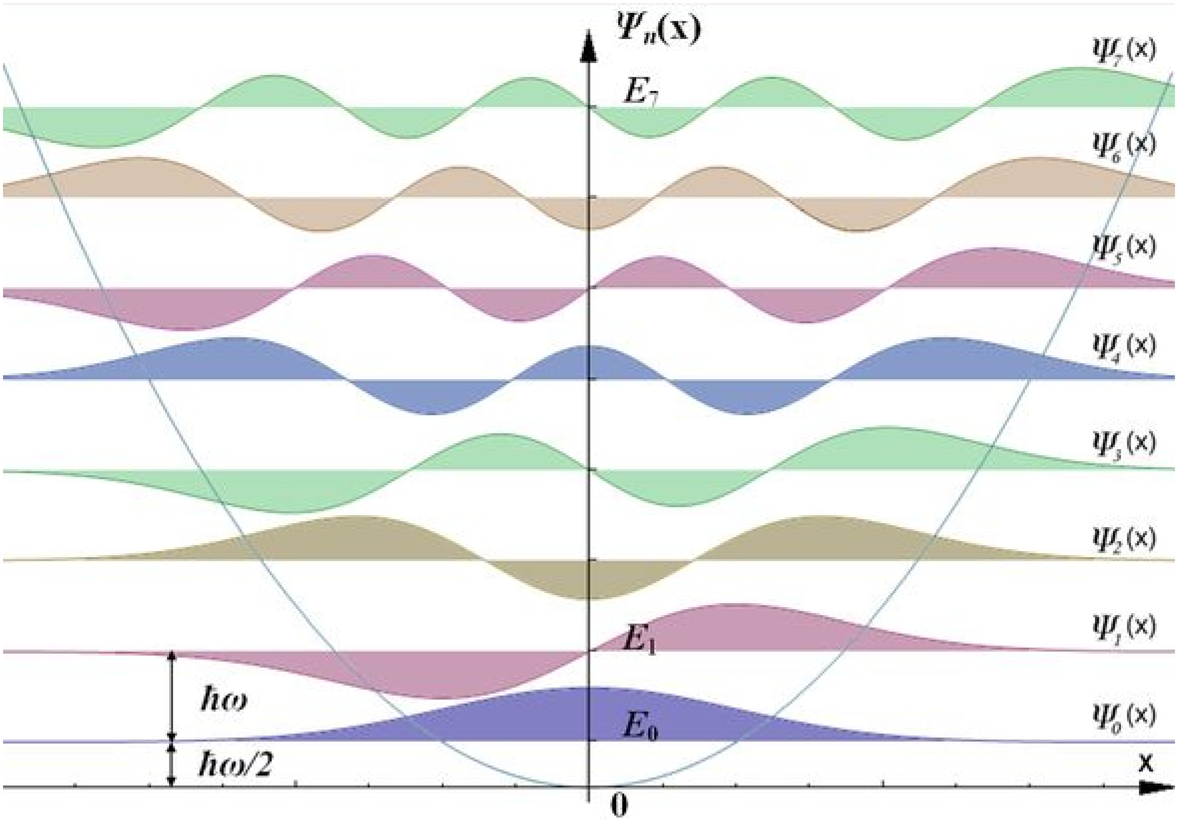
W obliczeniach przyjąłem kraniec przedziału $L = 5$, zaś rozmiar macierzy 1000x1000. Otrzymałem pięć najmniejszych wartości własnych:
$\lambda_1 = 0.500873$
$\lambda_2 = 1.50155$
$\lambda_3 = 2.50103$
$\lambda_4 = 3.50201$
$\lambda_5 = 4.50105$
Zaś wektory własne będące wartościami kolejnych funkcji falowych w zadanym przedziale zwizualizowałem na wykresie.



Rysunek 1. Pięć funkcji falowych będących rozwiązaniem równania Schrödingera, dla jednowymiarowego oscylatora harmonicznego.

3. Wnioski

Analitycznie energie oscylatora, odpowiadające stanom $\psi_n(x)$, dane są zależnością: $E_n(x) \;=\; h\omega(n+\frac{1}{2}),\ dla\ n = 0, 1, 2, 3, ...$
stąd widzimy, że nasze otrzymane wartości odbiegają nieznacznie od analitycznych wyników (są to tysięczne części ułamka), możemy je uznać za prawidłowo obliczone.
Wykresy kolejnych funkcji falowych wyznaczonych analitycznie:



Widzimy, że nasz wykres prezentuje takie same kształty jak ten przedstawiony powyżej, jedynie jest różnica co do znaku, może być to spowodowane błędem w obliczeniach, lub błędnym zastosowaniem wzoru, jednak w ten sposób potrafimy bardzo szybko wyznaczyć wartości i własności własne, nawet dla bardzo dużych macierzy.