

KMFCs - laboratorium 1

1 Zagadnienie do rozwiązania

Celem ćwiczenia jest rozwiązanie niezależnego od czasu równania Schroedingera postaci:

$$\begin{aligned}\hat{H}|\Psi\rangle &= E|\Psi\rangle \\ \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\end{aligned}\quad (1)$$

Dla uproszczenia można przyjąć, że $\hbar^2/2m = 1$, zatem hamiltonian przybiera postać

$$\hat{H}' = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (2)$$

(w dalszej części "prim" pominięto). Równanie różniczkowe (1) można sprowadzić do algebraicznego zagadnienia własnego rozwijając $|\Psi\rangle$ w szereg:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} c_i |\psi_i\rangle \quad (3)$$

gdzie kety $|\psi_i\rangle$ tworzą dowolny ortonormalny układ zupełny. Wstawiając (3) do równania Schroedingera (1) a następnie działając na obie jego strony bra $\langle\psi_j|$ otrzymuje się (nieskończony) układ równań:

$$\begin{aligned}\langle\psi_1|\hat{H}|\psi_1\rangle c_1 + \langle\psi_1|\hat{H}|\psi_2\rangle c_2 + \dots &= E c_1 \\ \langle\psi_2|\hat{H}|\psi_1\rangle c_1 + \langle\psi_2|\hat{H}|\psi_2\rangle c_2 + \dots &= E c_2 \\ &\dots\end{aligned}\quad (4)$$

W praktyce oczywiście używa się skończonej bazy:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^n c_i |\psi_i\rangle \quad (5)$$

co prowadzi do skończonego układu równań na współczynniki rozwinięcia c_i , który można zapisać jako algebraiczne zagadnienie własne:

$$h_{ij} \vec{c} = E \vec{c} \quad (6)$$

gdzie

$$h_{ij} = \langle\psi_i|\hat{H}|\psi_j\rangle = \int \psi_i^* \hat{H} \psi_j dx \quad (7)$$

a \vec{c} jest wektorem współczynników c_i .

Jeżeli potencjał $V(x)$ jest niezmienniczy względem transformacji $x \rightarrow -x$ to funkcje własne będą miały określoną parzystość. Zatem zagadnienie własne (6) można rozwiązać oddzielnie dla stanów parzystych i stanów nieparzystych.

Zadanie polega na napisaniu programu, który rozwiązuje numerycznie zagadnienie (6) dla dowolnego parzystego potencjału.

2 Szczegóły zadania

Zagadnienie (6) można rozwiązać pisząc program w języku C przy użyciu biblioteki procedur numerycznych biblioteki Eigen (eigen.tuxfamily.org). Całki (7) można obliczyć dowolną metodą numeryczną służącą do obliczania całek (np. trapezów, Simpsona, Gaussa, etc.). Jako funkcje bazy najwygodniej użyć dwu zbiorów funkcji, odpowiednio parzystych i nieparzystych:

$$|\psi_i^+ \rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{A}} \cos(\frac{i\pi}{A}x), & i = 1, 2, \dots, n, \\ \frac{1}{\sqrt{2A}}, & i = 0 \end{cases} \quad (8)$$

oraz

$$|\psi_i^- \rangle = \frac{1}{\sqrt{A}} \sin(\frac{i\pi}{A}x), \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (9)$$

gdzie A - stała.

Działanie programu należy najpierw sprawdzić dla potencjału prostokątnego typu

$$V_0(x) = \begin{cases} -V_0 & |x| < a \\ 0 & |x| \geq a \end{cases} \quad (10)$$

dla którego łatwo sprawdzić prawidłowość wyników.

Następnie obliczenia należy przeprowadzić dla dowolnego potencjału, np. potencjału Fermiego:

$$V(x) = \frac{-V_0}{1 + e^{(|x|-a)/R}} \quad (11)$$

gdzie V_0, a, R - stałe.

3 Opracowanie wyników

Zadanie ma na celu nie tylko napisanie programu, ale również dokonanie procedury testowej oraz wizualizacji wyników. W tym celu należy:

1. wykonać test zbieżności (np. dla potencjału stałego)
2. zwizualizować otrzymane funkcje własne dla potencjału Fermiego (przy pomocy dowolnego programu rysującego wykresy)

Parametry: $A=15$, $a=10/3$, $V_0=2.5$, $R=1$.