(1)

معادله پواسون $\nabla^2\varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon_0}$ ، $\rho = \frac{Q}{2\pi r}$

علت لاپلاسی در مختصات قطبی ← چرا؟ چون بار روی کره‌ای دو بعدی یعنی دایره مرکز گرفته است

$$\nabla^2 = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 u}{\partial\theta^2} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}$$

$$\nabla^2\varphi = -\frac{Q}{2\pi\varepsilon_0 r} \quad ، \quad \varphi(r,\theta)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{r}\frac{\partial\varphi}{\partial r} + \frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial\theta^2} = -\frac{Q}{2\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{r}\left(\frac{\varphi(r+\Delta r,\theta) - \varphi(r,\theta)}{\Delta r}\right) + \frac{\varphi(r+\Delta r,\theta) - 2\varphi(r,\theta) + \varphi(r-\Delta r,\theta)}{\Delta r^2}$$

$$+\frac{1}{r^2}\left(\frac{\varphi(r,\theta+\Delta\theta) - 2\varphi(r,\theta) + \varphi(r,\theta-\Delta\theta)}{\Delta\theta^2}\right) = -\frac{Q}{2\pi\varepsilon_0 r}$$

$$\Rightarrow \frac{1}{r}\frac{\varphi(r+\Delta r,\theta)}{\Delta r} + \frac{\varphi(r+\Delta r,\theta) + \varphi(r-\Delta r,\theta)}{\Delta r^2} + \frac{1}{r^2}\frac{\varphi(r,\theta+\Delta\theta) + \varphi(r,\theta-\Delta\theta)}{\Delta\theta^2} + \frac{Q}{2\pi\varepsilon_0 r}$$

$$= \varphi(r,\theta)\left(\frac{1}{r\Delta r} + \frac{2}{\Delta r^2} + \frac{2}{r^2\Delta\theta^2}\right)$$

②

$i \equiv r \qquad j = \theta$

$$\varphi(i,j) = \frac{1}{\left(\frac{1}{r[i]\Delta r} + \frac{2}{\Delta r^2} + \frac{2}{r[i]^2 \Delta\theta^2}\right)} \left(\frac{1}{r[i]} \frac{\varphi(i+1,j)}{\Delta r} + \frac{\varphi(i+1,j) + \varphi(i-1,j)}{\Delta r^2} \right.$$

$$\left. + \frac{1}{r[i]^2} \frac{\varphi(i,j+1) + \varphi(i,j-1)}{\Delta\theta^2} + \frac{Q}{2\pi\varepsilon_0 r[i]} \right) \Rightarrow$$

$r[i]=80$

وقتی که $r=80$ است $\varphi(i,j)$ برابر معادله روبرو است

$$\varphi(i,j) = \frac{1}{\left(\frac{1}{r[i]\Delta r} + \frac{2}{\Delta r^2} + \frac{2}{r[i]\Delta\theta^2}\right)} \left(\frac{1}{r[i]} \frac{\varphi(i+1,j)}{\Delta r} + \frac{\varphi(i+1,j) + \varphi(i-1,j)}{\Delta r^2} + \frac{1}{r[i]^2} \frac{\varphi(i,j+1) + \varphi(i,j-1)}{\Delta\theta^2} \right)$$

و برای بقیه r ها $\varphi(i,j)$ برابر این معادله است

$$\varphi(i,j) = \begin{array}{c|c} & \theta_0 \quad \theta_1 \quad \cdots \quad \theta_{max} \\ \begin{array}{c} r_0 \\ r_1 \\ \vdots \\ r_{max} \end{array} & \left[\begin{array}{c} \\ \\ \\ \\ \end{array} \right] \end{array}$$

← np.zeros((radius_mesh, angle_mesh)) را ابتدا

$r_{max} = 100$

$$\mathcal{H}|f\rangle = E|f\rangle \,,\quad \mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$|f\rangle$ ویژه حالت و یا ویژه بردار عملگر هامیلتونی $\mathcal{H}$ است

$\mathcal{H}$ عملگر هامیلتونی یک ماتریس هرمیتی است که بعد آن برابر اندازه مش بندی محور x برای بازه مورد نظر است

$\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ را بوسیله ماتریس لاپلاس تعریف کردیم و با ضرب کردن $-\frac{\hbar^2}{2m}$ در آن ماتریس هامیلتونی را بدست آوردیم

حال با استفاده از دستور np.linalg.eigh ویژه مقدارها و ویژه بردارهای $\mathcal{H}$ را بدست آوردیم => ویژه بردارهای بدست آمده همان $|f\rangle$ در معادله

$\mathcal{H}|f\rangle = E|f\rangle$ معادله مستقل از زمان شرودینگر

هستند

حال هر ویژه مقدار یک ویژه بردار نرمالایز شده بدست آمده است

$|f_i\rangle$ = eigenvectors[:, i] = ویژه بردار i ام است => صفحه وب

حال با استفاده از ویژه بردارهایی که بدست آورده ایم با استفاده از معادله وابسته به زمان شرودینگر، تحول زمانی ویژه بردارهای بدست آمده را بدست آوریم

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f = \hat{\mathcal{H}} f$$

تنها کافی است ویژه بردارهای بدست آمده را بعنوان تابع موج اولیه (psi0) به کدهایی که در اختیارمان قرار گرفته است بدهیم

dt = 0.002 ، ویژه بردار 0، 1 و 2

راهنمایی