Schrödingerjeva enačba, stacionaren problem

Miha Čančula

9. marec 2013

1 Matrika hamiltoniana

Za izračun lastnih energij sistema s hamiltonovim operatorjem $\hat{H}$ potrebujemo matrične elemente $H_{ij} = \langle\psi_i|H|\psi_j\rangle$ v neki ortonormirani bazi $|\psi_i\rangle$. Logična izbira za naš problem so lastna stanja harmonskega oscilatorja $|n\rangle$. Matrične elemente bi lahko izračunali neposredno iz lastnih stanja in hamiltonove matrike, dobljene z diskretizacijo prostora. Težava se pojavi, ko nas zanimajo višja vzbujena stanja. Pri rekurzivnem ali eksplicitnem računanju Hermitovih polinomov H_n za velike n (večje od 50) namreč hitro pridemo do odstevanja velikih števil, kar zaradi končne računalniške natančnosti privede do velikih napak. Dodatno ta stanja zelo hitro nihajo v prostoru, zato moramo za dober opis uporabiti zelo fino diskretizacjo.

Obema težavama se lahko v našem primeru izognemo, če matrične elemente izrazimo analitično. Vemo, da se hamiltonov operator za harmonski oscilator v bazi lastnih stanj $|n\rangle$ glasi

$$\hat{H}_0 = \frac{p^2}{2} + \frac{x^2}{2} = a^\dagger a + \frac{1}{2} \tag{1}$$

Drugi del potenciala, x^4, tudi lahko izrazimo s kreacijskim in anihilacijskim operatorjem

$$\begin{aligned}
x =& \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) && (2)\\
x^4 =& \frac{1}{4}(a^\dagger + a)^4 = \frac{1}{4}\left({a^\dagger}^2 + 1 + 2n + a^2\right)^2 && (3)\\
=& \frac{1}{4}\Big({a^\dagger}^4 + 1 + 4n^2 + a^4 + 2{a^\dagger}^2 + 4n + 2a^2 + && (4)\\
& + 2{a^\dagger}^2 n + 2n{a^\dagger}^2 + 2a^2 n + 2na^2 + {a^\dagger}^2 a^2 + a^2 {a^\dagger}^2\Big) && (5)
\end{aligned}$$

kjer je $n = a^\dagger a$, oznake za operatorje pa sem spuščal. Matrične elemente kreacijskega in anihilacijskega operatorja poznamo

$$\begin{aligned}
\langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle &= \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1} && (6)\\
\langle m|\hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1} && (7)\\
\langle m|\hat{n}|n\rangle &= n\,\delta_{m,n} && (8)
\end{aligned}$$

Če to vstavimo v izraz za x in združimo člene z enakimi δ_{ij}, dobimo rezultat

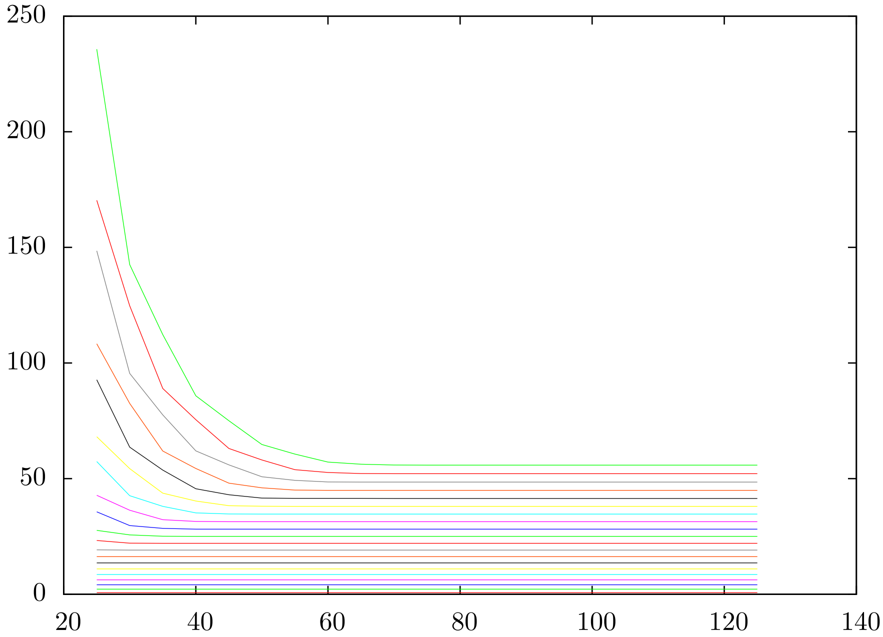
$$\begin{aligned}
4\langle m|\hat{x}^4|n\rangle =& \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)}\,\delta_{m,n-4} && (9)\\
& + 2(n-2+n+1)\sqrt{n(n-1)}\,\delta_{m,n-2} && (10)\\
& + \left(1 + 4n + 4n^2 + (n+1)(n+2) + n(n-1)\right)\delta_{m,n} && (11)\\
& + 2(n+2+n+1)\sqrt{(n+1)(n+2)}\,\delta_{m,n+2} && (12)\\
& + \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)}\,\delta_{m,n+4} && (13)
\end{aligned}$$

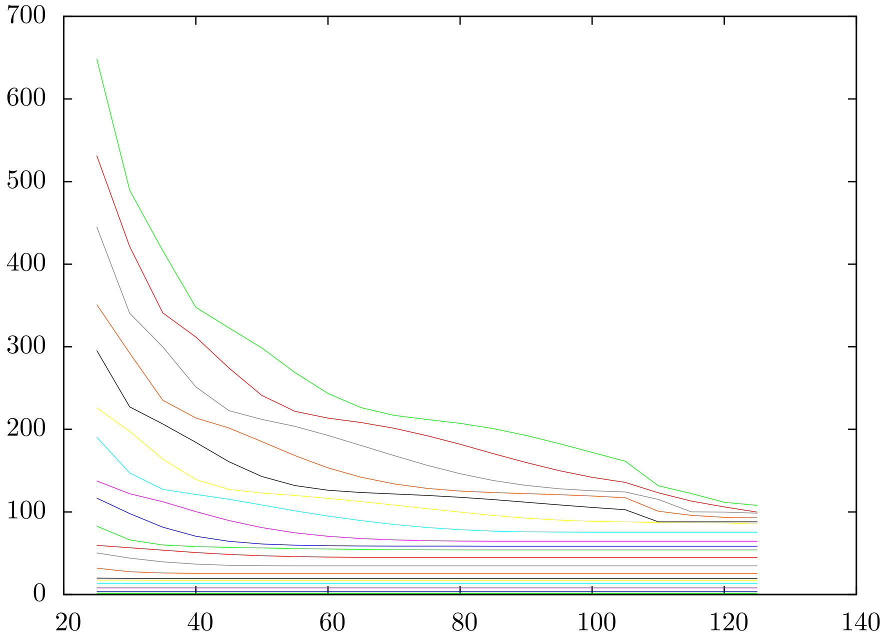
in končen izraz za matrični element H v bazi $|n\rangle$

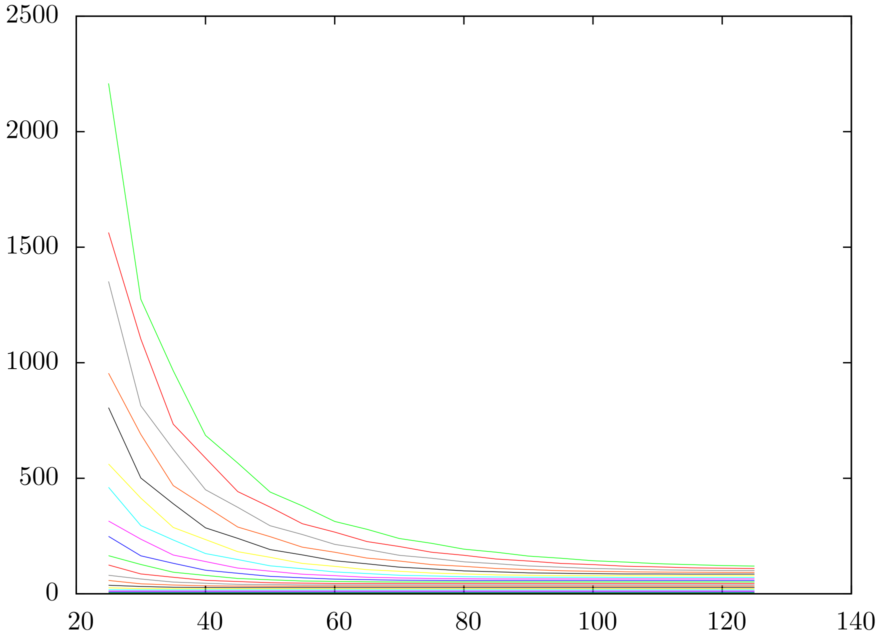
$$H_{mn} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\delta_{m,n} + \lambda\langle m|\hat{x}^4|n\rangle \tag{14}$$

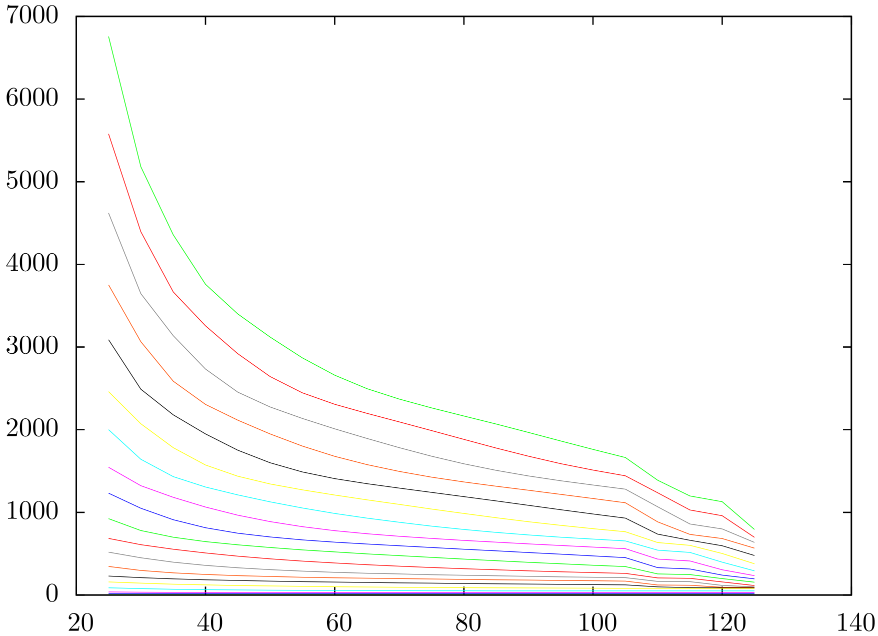
Matrika H ima pet neničelnih diagonal.

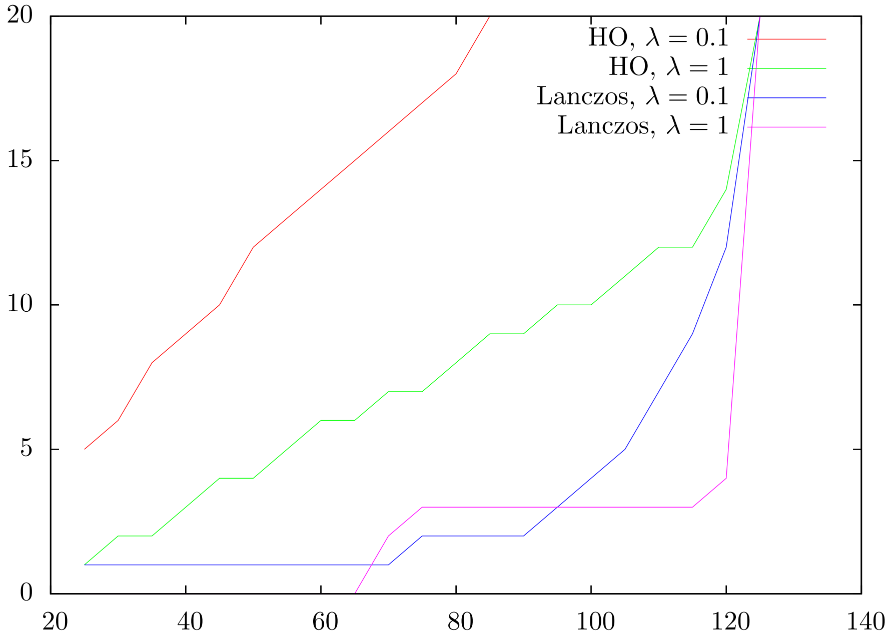
2 Konvergenca lastnih energij






2500
2000
1500
1000
500
0
20
40
60
80
100
120
140


7000
6000
5000
4000
3000
2000
1000
0
20
40
60
80
100
120
140



Pri večjem številu uporabljenih baznih stanj so se začele lastne vrednosti podvojevati.