

Schrödingerjeva enačba, stacionaren problem

Miha Čančula

10. 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 eksplisitem računanju Hermitovih polinomov H_n za velike n (večje od 50) namreč hitro pridemo do odštevanja 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 diskretizacijo.

Obema težavam 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

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

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

$$x = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) \quad (2)$$

$$x^4 = \frac{1}{4}(a^\dagger + a)^4 = \frac{1}{4} \left(a^{\dagger 2} + 1 + 2n + a^2 \right)^2 \quad (3)$$

$$= \frac{1}{4} \left(a^{\dagger 4} + 1 + 4n^2 + a^4 + 2a^{\dagger 2} + 4n + 2a^2 + \right. \quad (4)$$

$$\left. + 2a^{\dagger 2}n + 2na^{\dagger 2} + 2a^2n + 2na^2 + a^{\dagger 2}a^2 + a^2a^{\dagger 2} \right) \quad (5)$$

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

$$\langle m | \hat{a}^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \quad (6)$$

$$\langle m | \hat{a} | n \rangle = \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \quad (7)$$

$$\langle m | \hat{n} | n \rangle = n \delta_{m,n} \quad (8)$$

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

$$4\langle m | \hat{x}^4 | n \rangle = \sqrt{n(n-1)(n-2)(n-3)} \delta_{m,n-4} \quad (9)$$

$$+ 2(n-2+n+1)\sqrt{n(n-1)} \delta_{m,n-2} \quad (10)$$

$$+ (1+4n+4n^2+(n+1)(n+2)+n(n-1)) \delta_{m,n} \quad (11)$$

$$+ 2(n+2+n+1)\sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} \quad (12)$$

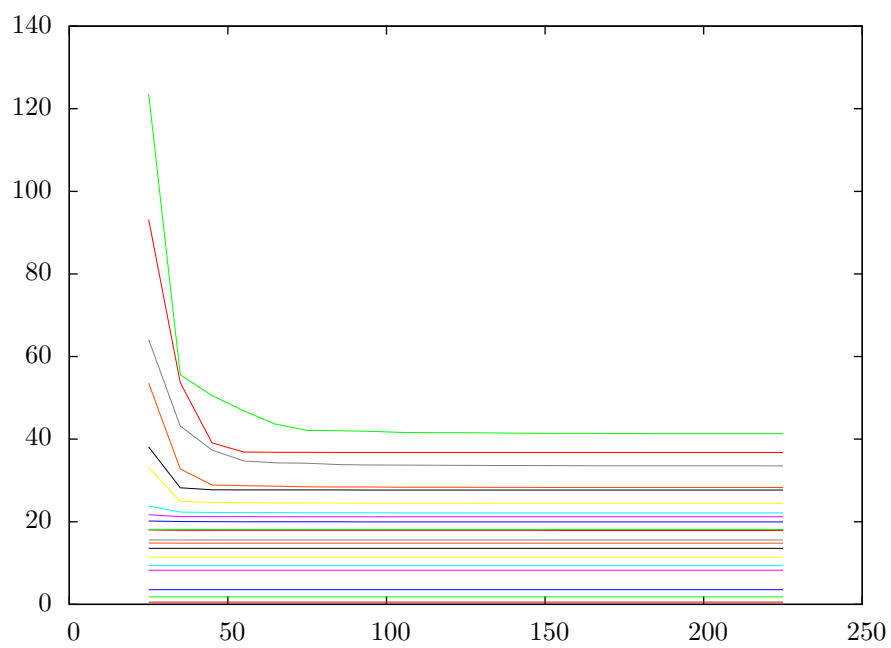
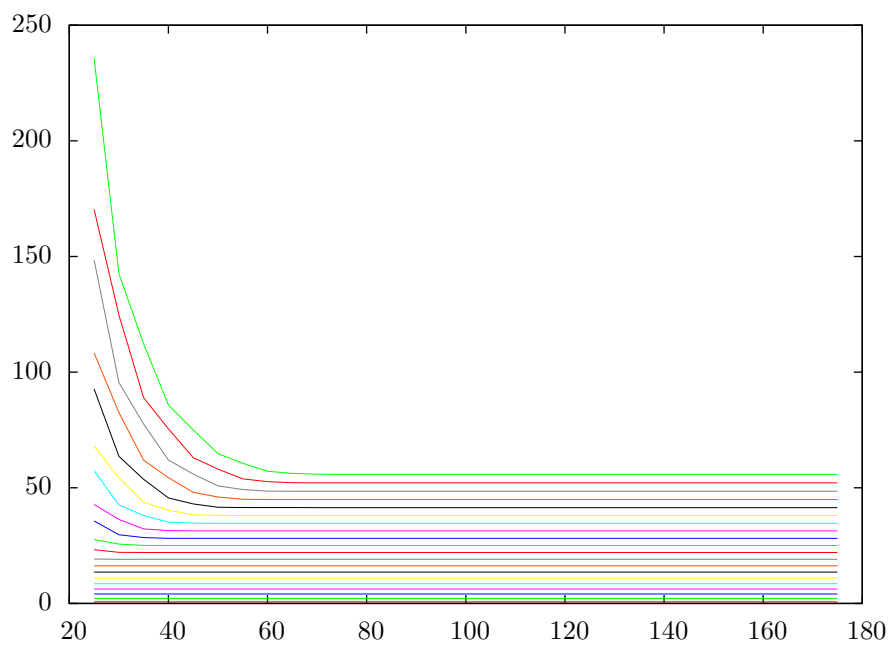
$$+ \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)(n+4)} \delta_{m,n+4} \quad (13)$$

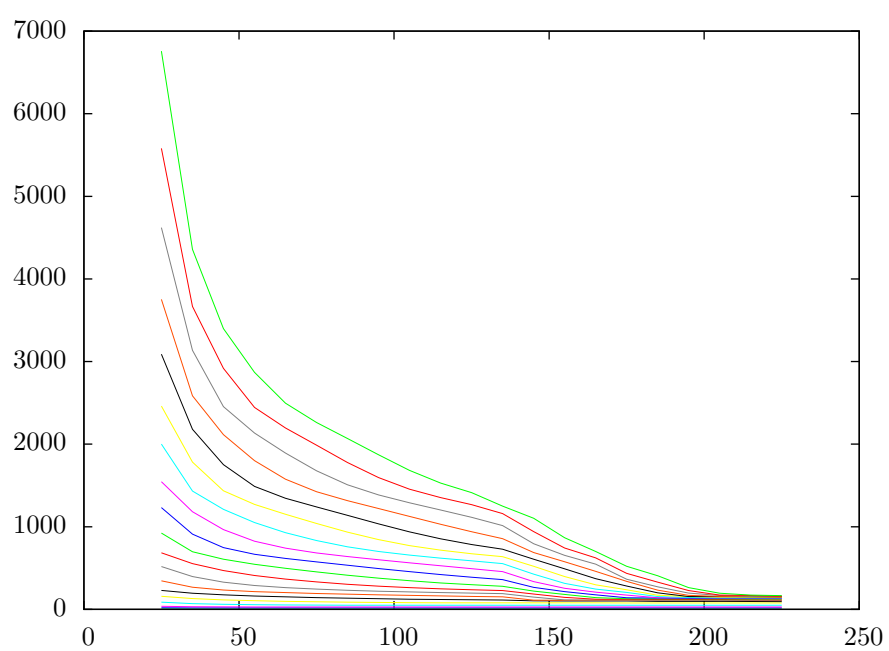
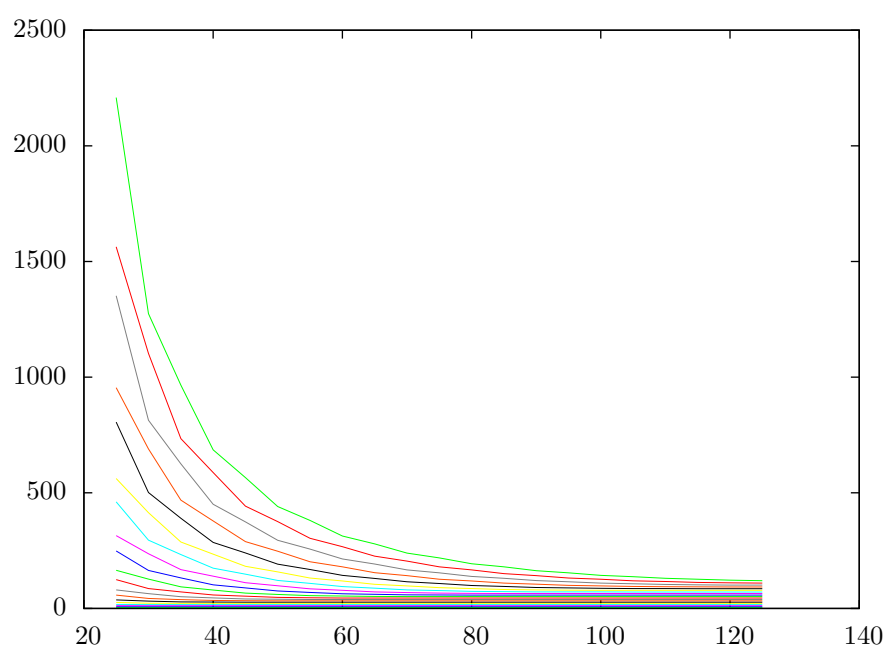
in končen izraz za matrični element H v bazi $|n\rangle$

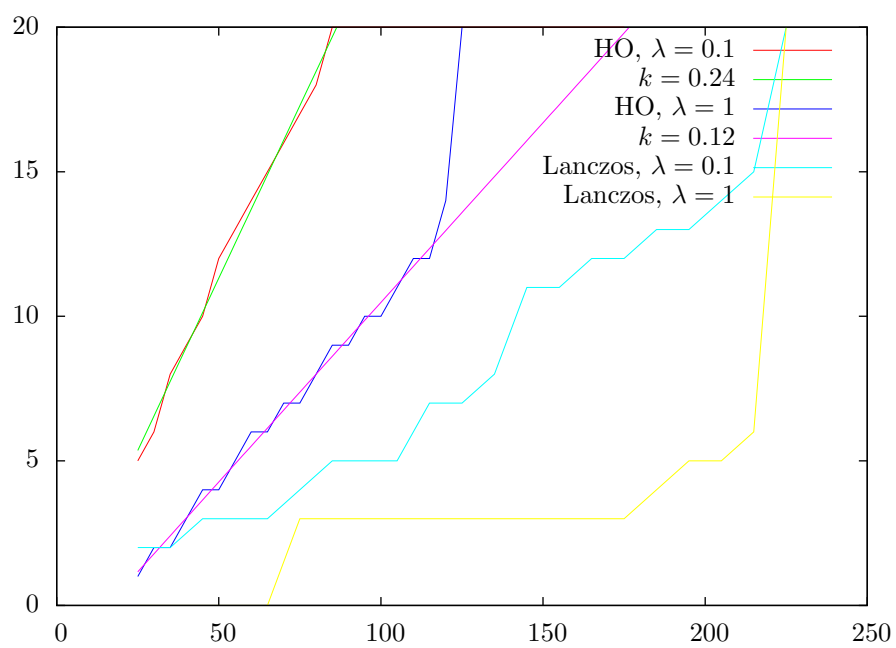
$$H_{mn} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \delta_{m,n} + \lambda \langle m | \hat{x}^4 | n \rangle \quad (14)$$

Matrika H ima pet neničelnih diagonal.

2 Konvergenca lastnih energij







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