Московский государственный университет
имени М. В. Ломоносова

Физический факультет

Кафедра физики частиц и космологии

Курсовая работа
«Дискретная теорема Нётр»

Выполнил студент 2 курса, 213 группы
Бобров Дмитрий Денисович

Научный руководитель
д.ф.-м.н., профессор Белокуров Владимир Викторович

Москва 2023

Содержание

1 Введение

В классической механике симметрии в уравнениях Лагранжа и законы сохранения связывает теорема Нетер [1]. Преобразование $t, q \longleftrightarrow \widehat{t}, \widehat{q}$ является преобразованием симметрии, если оно связано с лагранжевой системой следующим образом:

$$L\Big(\widehat{t}, \widehat{q}, \frac{d\widehat{q}}{dt}\Big)\frac{d\widehat{t}}{dt} = L\Big(t, q, \frac{dq}{dt}\Big)$$

Теорема Нетер Пусть однопараметрическое преобразование $\widehat{t} = \widehat{t}(t, q, \tau)$, $\widehat{q} = \widehat{q}(t, q, \tau)$ - преобразование симметрии для лагранжевой системы, определенной функцией $L(t, q, \dot{q})$. Тогда у системы есть первый интеграл

$$I = \sum p_i \eta_i - \xi H,$$

где

$$\xi(t, q) = \frac{\partial \widehat{t}(t, q, \tau)}{\partial \tau}\bigg|_{\tau=0}, \quad \eta_i(t, q) = \frac{\partial \widehat{q}_i(t, q, \tau)}{\partial \tau}\bigg|_{\tau=0},$$

а p_i и H - обобщенный импульс и функция Гамильтона:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad H(t, q, p) = \sum p_i \dot{q}_i - L(t, q, \dot{q}).$$

В квантовой механике оператор, не зависящий от времени явно, сохраняется, если коммутирует с гамильтонианом. Для свободной частицы движущейся вдоль оси x $\widehat{H} = \frac{\widehat{p}_x^2}{2m}$. Видно что такой гамильтониан не меняется при трансляциях $\widehat{T}_s$ на любое число s по координате x. Данной симметрии соответствует сохраняющийся оператор - импульс $\widehat{p}_x$, собственные состояния которого, соответствующие собственному значению p, имеют вид:

$$\psi = Ae^{ipx} \tag{1}$$

В случае движения частицы в периодическом потенциале $U(x) = U(x + a)$, гамильтониан $\widehat{H} = \frac{\widehat{p}_x^2}{2m} + U(x)$ обладает симметрией относительно сдвигов на a. Периодические потенциалы такого рода возникают в физике твердого тела. Например, в задаче о поведении электрона в поле кристалической решетки, которая описывается пространственно-периодическим внешнем электрическим полем.

Теорема Блоха [2, гл. 8] отвечает на вопрос о поведении собственных функций гамильтониана в таком периодическом потенциале $U(x)$:

Теорема Блоха Собственные состояния одночастичного гамильтониана $\widehat{H} = \frac{\widehat{p}_x^2}{2m} + U(x)$ могут быть выбраны так, чтобы их волновые функции имели вид плоской волны умноженной на функцию с периодом a, т.е.

$$\psi_k = e^{ikx} u_k(x), \quad u_k(x + a) = u_k(x) \tag{2}$$

Смысл k в том, что он определяет поведение волновой функции при трансляциях: преобразование умножает ее на e^{ika},

$$\psi_k(x + a) = e^{ika}\psi_k(x)$$

Отсюда следует, что k неоднозначна: значения отличающиеся на $\frac{2\pi}{a}$ физически эквивалентны, так как приводят к одинаковому поведению волновых функций.

Функции (2) схожи с волновыми функциями свободной частицы (1) - плоскими волнами $\psi = Ae^{ipx}$; при этом число k, которое называется квазиимпульсом, играет роль сохраняющегося импульса соотвествующего дискретной симетрии на a, и служит естественным обобщением импульса на случай периодического потенциала.

Помимо трансляционных симметрий у гамильтониана свободной частицы движущейся в 2 мерном пространстве присутствует вращательная симметрия по полярному углу φ. Соответствующая сохрняющаяся величина - оператор момента импульса $\widehat{l} = \widehat{x}\widehat{p}_y - \widehat{y}\widehat{p}_x$, с собственными состояниями при энергии E:

$$\psi = e^{il\varphi} J_l(\sqrt{2mE}\rho), \quad \forall l \in \mathbb{Z} \tag{3}$$

где $J_n(x)$ - функции Бесселя первого рода порядка n, (φ, ρ) - полярные координаты.

В данной работе рассматривается возможность ввести понятие квазиимпульса для случая когда гамильтониан периодичнен по произвольной координате. Для частного случая, когда в роли координаты выступает полярный угол, находятся собственые состояния квазимомента импульса.

2 Дискретная симметрия

Обобщим теперь выше изложенный подход на случай, когда потенциал U какой-либо системы периодичен по одной из координат q с периодом τ: $U(q+\tau) = U(q)$. Из этого следует что $\widehat{T}_\tau$, унитарный оператор трансляции по координате q на τ, коммутирует с потенциалом:

$$\widehat{T}_\tau U(\widehat{q})\widehat{T}_\tau^{-1} = U(\widehat{q}+\tau) = U(\widehat{q}) \Rightarrow \widehat{T}_\tau U(\widehat{q}) = U(\widehat{q})\widehat{T}_\tau$$

Гамильтониан $\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + U(\widehat{q})$ будет коммутировать с $\widehat{T}_\tau$ только при условии $[\widehat{p}^2, \widehat{T}_\tau] = 0$. В координатном представлении $\widehat{p}^2 = -\Delta$, поэтому мы будем рассматривать только такие системы координат в которых оператор Лапласа Δ не зависит явно от q, так как в этом случае $[\widehat{p}^2, \widehat{T}_\tau] = 0$. Среди декартовой, цилиндрической и сферической системами координат таким свойством обладают только декартовы коодинаты x, y, z и полярный угол φ:

$$\text{Декартова } \Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$
$$\text{Цилиндрическая } \Delta = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\rho\frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$
$$\text{Сферическая } \Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \theta}\sin(\theta)\frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2\sin(\theta)}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

Пусть $\widehat{H}$ коммутирует с $\widehat{T}_\tau$, тогда собственные состояния гамильтониана можно выбрать таким образом, что они являются собственными и для для оператора $\widehat{T}_\tau$:

$$\widehat{H}\psi = E\psi$$

$$\widehat{T}_\tau\psi(q) = \lambda\psi(q) = \psi(q+\tau)$$

В силу нормированности волновых функций $|\lambda| = 1$, по аналогии с квазиимульсом, можно записать собственное значение в виде: $\lambda = e^{ik\tau}$, а волновые функии относящиеся к этому собственному значению обозначить как $\psi_k(q)$

$$\psi_k(q+\tau) = e^{ik\tau}\psi_k(q) \Rightarrow \psi_k(q)e^{-ikq} = \psi_k(q+\tau)e^{-ik(q+\tau)} = U_k(q), \quad U_k(q+\tau) = U_k(q) \quad \Rightarrow$$
$$\psi_k(q) = e^{ikq}U_k(q) \tag{4}$$

Так как U_k периодична, то ψ можно представить в виде ряда Фурье:

$$\psi_k(q) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} u_{kn} e^{i(k+\frac{2\pi}{\tau}n)q} \tag{5}$$

, то есть ψ_k есть суперпозиция собственных состояний импульса, соответствующих собственным значениям $k + \frac{2\pi}{\tau}n, n \in \mathbb{Z}$.

Множество $\{\widehat{T}_{n\tau}\}$ образует группу дискретных симметрий гамильтониана $\widehat{H}$ по координате q. Мы хотим построить такой сохраняющийся оператор квазиимпульса $\widehat{k}$, что он связан с группой дискретных трансляции $\{\widehat{T}_{n\tau}\}$ также, как и в случае непрерывной симметрии обычный импульс связан с оператором трансляций. То есть $\widehat{k}$ должен удовлетворять 2 условиям:
1) $\widehat{k}$ коммутирует с гамильтонианом $\widehat{H}$
2) $\widehat{T}_{n\tau} = e^{i\widehat{k}n\tau}$.

Для удовлетворения 1 условия разумно искать оператор $\widehat{k}$ как функцию от $\widehat{T}_\tau$, потому что тогда из $[\widehat{T}_\tau, \widehat{H}] = 0$ следует $[\widehat{k}, \widehat{H}] = 0$. При этом из 2 условия $\widehat{T}_\tau$ есть функция $\widehat{k}$, следовательно между $\widehat{T}_\tau$ и $\widehat{k}$ будет взаимооднозначное соответствие.

Функция от оператора в квантовой механике опеределяется рядом Тейлора это функции по оператору. Следовательно функция от оператора есть оператор с теми же собственными векторами, у которых собственнные значения получаются путем действием этой функции на соответсвующие собственные значения изначального оператора. Поэтому каждая собственная функция оператора $\widehat{T}_\tau$ с собственным значением λ будет собственной и для $\widehat{k}$ с собственным значением k удовлетворяющем уравнению: $\lambda = e^{ik\tau}$. Получаем, что для данного λ значение k должно быть одним из множества $\frac{\mathrm{Ln}(\lambda)}{i\tau} = \{k + \frac{2\pi}{\tau} n \,|n \in \mathbb{Z}\}$. Все эти значения соответствуют одному и тому же состоянию.

Для определение оператора $\widehat{k}$ нужно однозначно определить его действие на собственные вектора, то есть выбрать конкретные значения $k + \frac{2\pi}{\tau} n$ для всех собственных векторов. Таким образом полученные операторы будут отличаться только собственными значениями для одних и тех же собственных векторов, то есть являтся функциями друг друга. Можно рассмотреть один из них таких операторов, например, с наименьшими неотрицательными из возможных собственных значений:

$$\widehat{k}\psi_k = [k]_{\frac{2\pi}{\tau}} \psi_k, \quad \text{где } [b]_a = \min\{x \geq 0 \,|\, x = b \pmod a\}$$

При этом видно, что сохранение квазиимпульса $\widehat{k}_t$ соответствующего периодичности на t включает в себя и сохранение $\widehat{k}_\tau$ соответствующее периоду $\tau > t$, а в переделе $t \to 0$ переходит в сохранение обычного импульса.

Общие собственные функции гамильтониана и квазиимпульса (5): $\psi_k(q) = \sum\limits_{n=-\infty}^{\infty} U_{kn} e^{i(k+\frac{2\pi}{\tau}n)q}$, не являются собственными для оператора импульса. Однако, для оператора $[\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}}$, получающегося из оператора импульса соответсвующего координате q путем замены каждого собственного значения p на его остаток от деления на $\frac{2\pi}{\tau}$, они являются собственными, так как все функции вида $e^{i(k+\frac{2\pi}{\tau}n)q}, n \in \mathbb{Z}$ соответсвуют отдному и тому же собственному значению $[k]_{\frac{2\pi}{\tau}}$:

$$[\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}} \psi_k = [\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(k+\frac{2\pi}{\tau}n)q} U_{kn} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \underbrace{[k + \frac{2\pi}{\tau} n]_{\frac{2\pi}{\tau}}}_{[k]_{\frac{2\pi}{\tau}}} e^{i(k+\frac{2\pi}{\tau}n)q} U_{kn} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} [k]_{\frac{2\pi}{\tau}} e^{i(k+\frac{2\pi}{\tau}n)q} U_{kn} =$$

$$= [k]_{\frac{2\pi}{\tau}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i(k+\frac{2\pi}{\tau}n)q} U_{kn} = [k]_{\frac{2\pi}{\tau}} \psi_k = \widehat{k}\psi_k$$

Таким образом мы получили, что оператор $[\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}}$ действует на собственные функции гамильтониана ψ_k также как и $\widehat{k}$, а значит $\widehat{k} = [\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}}$. Можно явно показать сохранение такого оператора:

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + V(\widehat{q}), \quad V(\widehat{q}) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\frac{2\pi}{\tau}nq} V_n$$

$$[\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}} V(\widehat{q})\psi = [\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\frac{2\pi}{\tau}nq} V_n \int dp\, e^{ipq} \psi_p = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int dp \underbrace{[p + \frac{2\pi}{\tau} n]_{\frac{2\pi}{\tau}}}_{=[p]_{\frac{2\pi}{\tau}}} e^{i(p+\frac{2\pi}{\tau}n)q} V_n \psi_p =$$

$$= \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\frac{2\pi}{\tau}nq} V_n \int dp\, [p]_{\frac{2\pi}{\tau}} e^{ipq}\psi_p = V(\widehat{q})[\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}}\psi \quad \Rightarrow \Big[[\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}}, V(\widehat{q})\Big] = 0$$

$$\Big[[\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}}, \widehat{H}\Big] = \underbrace{\Big[[\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}}, \frac{\widehat{p}^2}{2m}\Big]}_{=0} + \Big[[\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}}, V(\widehat{q})\Big] = 0$$

Коммутаторы $\widehat{q}$ и $\widehat{p}$ с $\widehat{k}$

Так как $\widehat{k} = [\widehat{p}_q]_{\frac{2\pi}{\tau}}$, т.е. функция от $\widehat{p}_q$, то $[\widehat{k}, \widehat{p}_q] = 0$.
Для вычисления $[\widehat{q}, \widehat{k}]$ понадобится следующая формула [4, 3.22]:

$$e^{tA}Be^{-tA} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \underbrace{[A, [A, \ldots, [A}_{k}, B] \ldots] \tag{6}$$

Из общих соображений можно найти результат действия преобразования $\widehat{T}_{n\tau}$ на некоторые наблюдаемые $\widehat{A}$, т.е. мы знаем оператор $\widehat{T}_{n\tau}\widehat{A}\widehat{T}_{n\tau}^{\dagger}$. Далее, с помощью формулы (6) получается связь между известным оператором $\widehat{T}_{n\tau}\widehat{A}\widehat{T}_{n\tau}^{\dagger}$ и коммутатором $[\widehat{k}, \widehat{A}]$ посредством следующего ряда:

$$\widehat{T}_{n\tau}\widehat{A}\widehat{T}_{n\tau}^{\dagger} = e^{i\widehat{k}n\tau}\widehat{A}e^{-i\widehat{k}n\tau} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(in\tau)^m}{m!} \underbrace{[\widehat{k}, [\widehat{k}, \ldots, [\widehat{k}}_{m}, \widehat{A}] \ldots], \quad \forall n \in \mathbb{Z} \tag{7}$$

из которого в некоторых частных случая можно найти $[\widehat{k}, \widehat{A}]$.

Так как $\widehat{T}_\tau$ - оператор трансляции по координате q на τ, то $\widehat{T}_\tau\widehat{q}\widehat{T}_\tau{}^\dagger = \widehat{q} + \tau$. $\widehat{k}$ коммутирует с $\widehat{T}_\tau$, следовательно

$$\widehat{T}_\tau[\widehat{k}, \widehat{q}]\widehat{T}_\tau{}^\dagger = [\widehat{k}, \widehat{T}_\tau\widehat{q}\widehat{T}_\tau{}^\dagger] = [\widehat{k}, \widehat{q} + \tau] = [\widehat{k}, \widehat{q}] \;\Rightarrow [\widehat{T}_\tau, [\widehat{k}, \widehat{q}]] = 0$$

Если $\widehat{k}$ есть функция $\widehat{T}_\tau$, то $[\widehat{T}_\tau, [\widehat{k}, \widehat{q}]] = 0 \;\Rightarrow\; [\widehat{k}, [\widehat{k}, \widehat{q}]] = 0$. Подставляя это в ряд (7) для сдвинутового $\widehat{q}$, получаем что все кроме первого коммутатора сокращается:

$$\widehat{q} + \tau = \widehat{T}_\tau\widehat{q}\widehat{T}_\tau{}^\dagger = \widehat{q} + i\tau[\widehat{k}, \widehat{q}] + \frac{(i\tau)^2}{2}\underbrace{[\widehat{k}, [\widehat{k}, \widehat{q}]]}_{=0} + \frac{(i\tau)^3}{6}[\widehat{k}, \underbrace{[\widehat{k}, [\widehat{k}, \widehat{q}]]}_{=0}] + \cdots = \widehat{q} + i\tau[\widehat{k}, \widehat{q}] \;\Rightarrow$$

$$[\widehat{q}, \widehat{k}] = i$$

Этот результат полностью совпадает с соотношениями для обычных импульсов:
$[\widehat{x}, \widehat{p}_x] = i,\; [\widehat{y}, \widehat{p}_y] = i,\; [\widehat{z}, \widehat{p}_z] = i,\; [\widehat{\varphi}, \widehat{m}_z] = i$

3 Квазимомент импульса

Пусть теперь в роли координаты q будет полярный угол φ, а система будет симметрична относительно поворота на ϕ, которому соответствует оператор $\widehat{R}_\phi$. Так как само пространство всегда периодично на 2π, то 2π должно быть кратно ϕ, т.е. $\phi = \frac{2\pi}{t}, t \in \mathbb{N}$, а для того чтобы волновые функции были однозначными, необходимо, чтобы $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$, отсюда находим возможные собственный значения квазимомента

$$\forall l \;\; \psi_l(\varphi) = \psi_l(\varphi + 2\pi) = e^{il\varphi + il2\pi}U_l(\varphi + 2\pi) = e^{il\varphi}U_l(\varphi)e^{il2\pi} = \psi_l(\varphi)e^{il2\pi} \;\Rightarrow l \in \mathbb{Z}$$

Значения $\widehat{l}$ определены с точность до $\frac{2\pi}{\phi} = \frac{2\pi}{\frac{2\pi}{t}} = t$. В итоге получаем что квазимомент может принимать t подряд идущих целых значения: $l = 0, 1, \cdots, t-1$.

Рассмотрим 2 мерное пространство с периодическим потенциалом $V(\varphi) = V(\varphi + \phi)$. Собственные состояния $\widehat{l}$ имеют вид $\psi_l = e^{il\varphi}u_l(\varphi)$ и удовлетворяют стационарному уравнению Шредингера:

$$\left(-\frac{\Delta}{2m} + V(\varphi)\right)\psi_l = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)\psi_l(\rho,\varphi) + V(\varphi)\psi_l = E\psi_l \tag{8}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial u}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\Big(-l^2u + 2il\frac{\partial u}{\partial\varphi} + \frac{\partial^2 u}{\partial\varphi^2}\Big) - 2mVu = -2mEu \tag{9}$$

Численные расчеты

Мы хотим получить решение уравнения (8) в виде собственного состояния оператора квазимомента импульса, т.е. в виде $\psi_l = e^{il\varphi}u_l(\varphi)$. В силу одинакового периода ϕ у функций $u_l(\varphi)$ и $V(\varphi)$ разумно искать численное решение в области $D = \{(\varphi,\rho)|\varphi \in [0,\phi)\ \rho \in [0,R]\}$, удовлетворяющее граничному условию: $u_l(\phi) = u_l(0)$.
Введем в области D сетку

$$\{(\varphi_m,\rho_n)\,|\varphi_m = ma, m = \overline{0, M-1},\ \rho_n = nh, n = \overline{1, N}\}$$

$u_{n,m}$ - сеточные знаения функции u. Заменим уравнение (9), на соответствующее разностное уравнение:

$$\frac{u_{n+1,m} - 2u_{n,m} + u_{n-1,m}}{h^2} + \frac{1}{\rho_n}\frac{u_{n+1,m} - u_{n-1,m}}{2h} - 2mV_{n,m}u_{n,m} +$$
$$+\frac{1}{\rho_n^2}\Big(-l^2u_{n,m} + 2il\frac{u_{n,m+1} - u_{n,m-1}}{2a} + \frac{u_{n,m+1} - 2u_{n,m} + u_{n,m-1}}{a^2}\Big) = -2mEu_{n,m}$$

Которое преобразуется к виду

$$\underbrace{\Big(\frac{1}{h^2} + \frac{1}{2\rho_n h}\Big)}_{\alpha}u_{n+1,m} - \underbrace{\Big(\frac{2}{h^2} + \frac{2}{a^2\rho_n^2} + \frac{l^2}{\rho_n^2} + 2mV_{n,m}\Big)}_{c_{n,m}}u_{n,m} + \underbrace{\Big(\frac{1}{h^2} - \frac{1}{2\rho_n h}\Big)}_{\beta}u_{n-1,m} +$$

$$+\frac{1}{\rho_n^2}\Big(\frac{1}{a^2} + \frac{il}{a}\Big)u_{n,m+1} + \frac{1}{\rho_n^2}\Big(\frac{1}{a^2} - \frac{il}{a}\Big)u_{n,m-1} = -2mEu_{n,m}$$

Запишем значения $u_{n,m}$ в виде столбца $x_{mN+n} = u_{n,m}$, тогда полученна система преобразуется к виду $Ax = \lambda x$

$$A = \begin{pmatrix} -C_0 & B & \dots & 0 & B^\dagger \\ B^\dagger & -C_1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -C_{M-1} & B \\ B & 0 & \dots & B^\dagger & -C_{M-1} \end{pmatrix},$$

$$C_m = \begin{pmatrix} c_{0,m} & -\alpha & 0 & \dots \\ -\beta & c_{1,m} & -\alpha & \dots \\ 0 & -\beta & c_{2,m} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},\ B = \Big(\frac{1}{a^2} + \frac{il}{a}\Big)\begin{pmatrix} \frac{1}{\rho_0^2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{1}{\rho_1^2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{1}{\rho_2^2} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},\ \lambda = -2mE$$

Таким образом, необходимо найти собственный вектор x матрицы A с собственные значением $-2mE$. Для поиска применим метод итераций Рэлея. Итеративный алгоритм:

$$x_{i+1} = \frac{(A-\lambda_i)^{-1}x_i}{||(A-\lambda_i)^{-1}x_i||}, \quad \lambda_{i+1} = \frac{x_{i+1}^\dagger A x_{i+1}}{x_{i+1}^\dagger x_{i+1}}, \quad \lambda_0 = -2mE$$

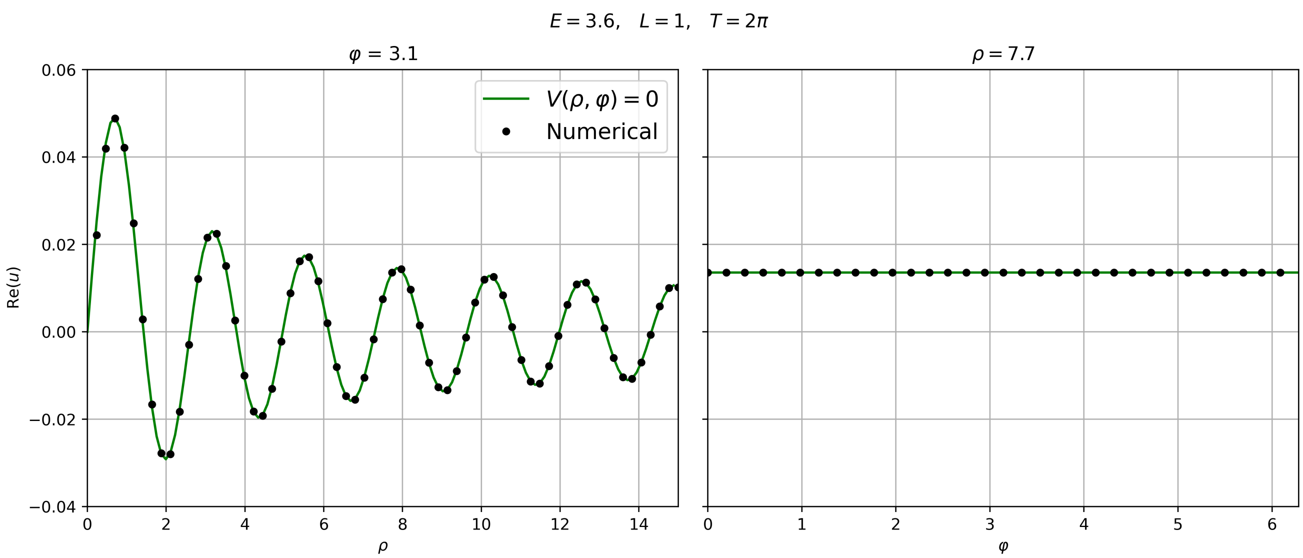
Для нахождения вектора $y = (A-\lambda)^{-1}x$ будем решать систему

$$(A-\lambda)y = x$$

с блочной трехдиагональной матрицей $(A-\lambda)$ модифицированным методом прогонки для периодических граничных условий [5].

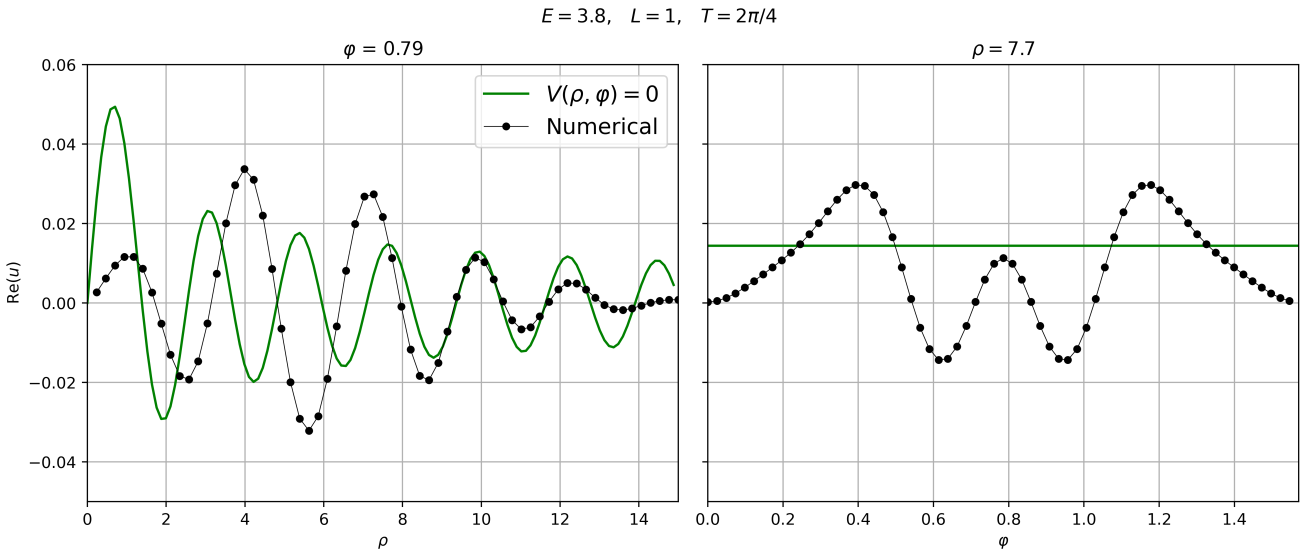
Проверим реализацию численного метода на известном аналитическом решении для свободной частицы (3)

$$V(\rho,\varphi) = 0 \quad \Rightarrow \quad \psi = Ae^{il\varphi}J_l(\sqrt{2mE}\rho) \quad \Rightarrow \quad u = J_l(\sqrt{2mE}\rho)$$

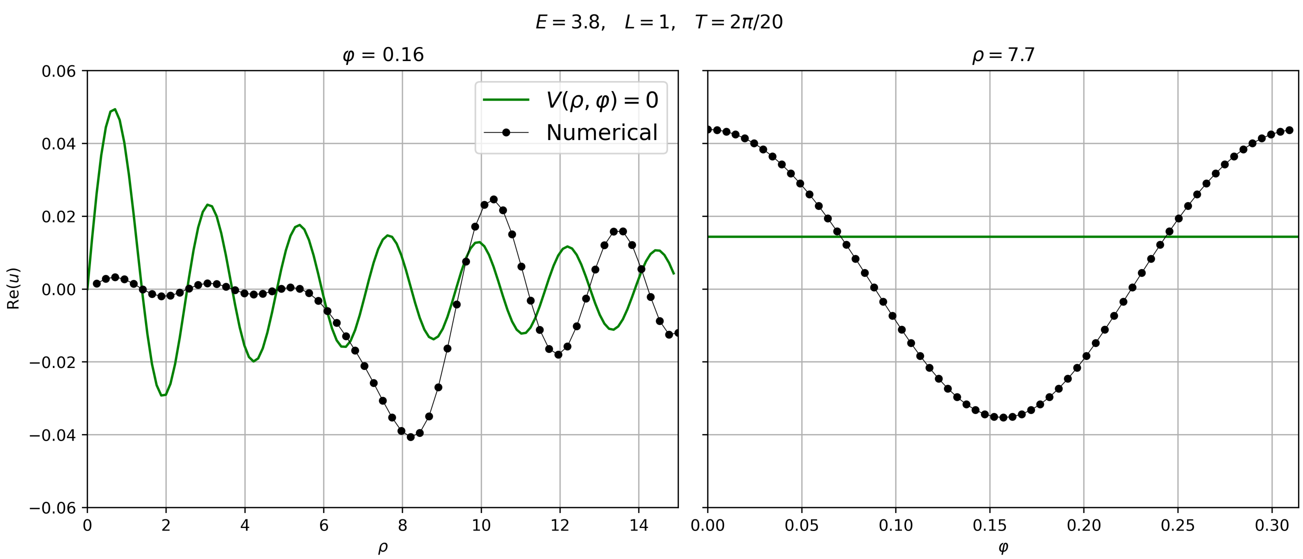


Далее приводятся численные решения для трех видов потенциалов с квази моментом $l = 1$, которые сравниваются с решением для $V(\rho,\varphi) = 0$.

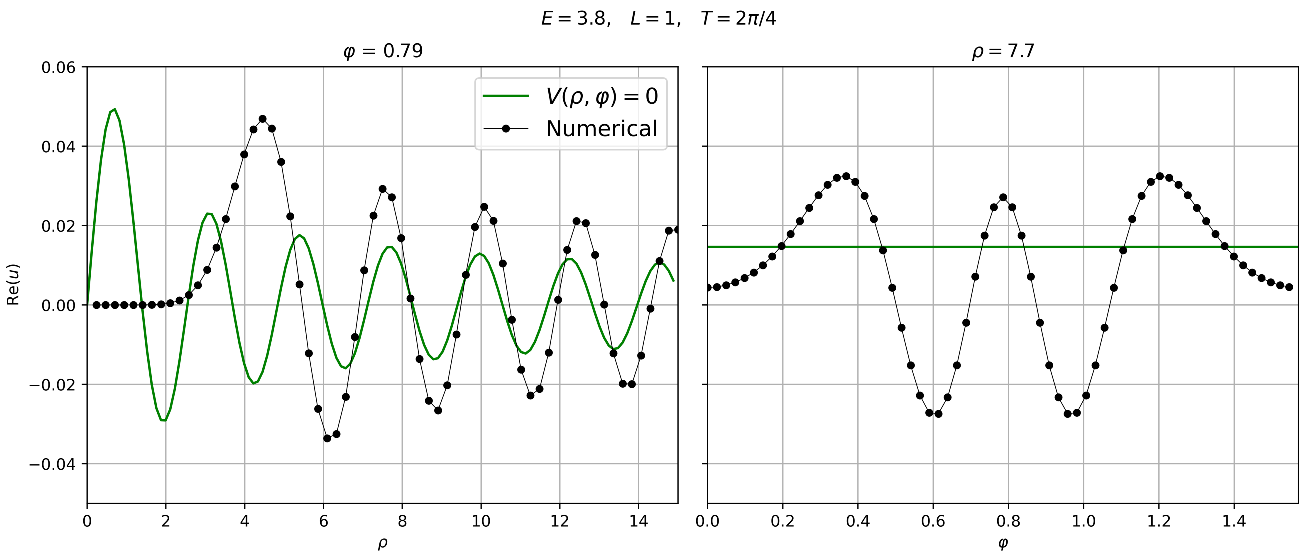
$$V_1(\rho, \varphi) = \cos(4\varphi)$$



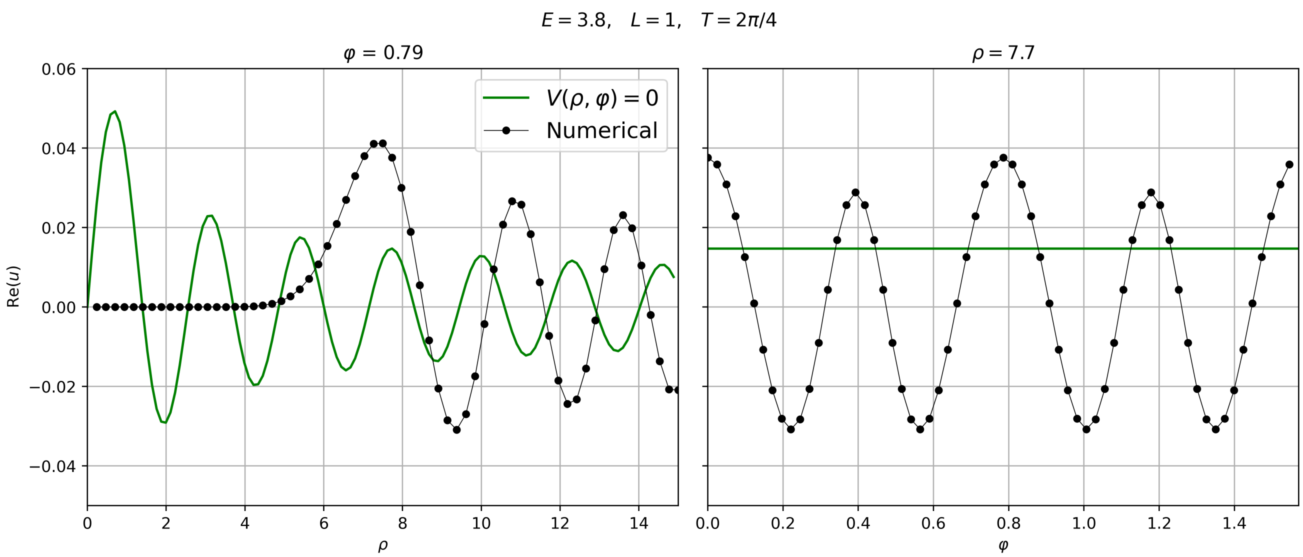
$$V_1(\rho, \varphi) = \cos(20\varphi)$$



$$V_2(\rho, \varphi) = \frac{100\cos(4\varphi)}{\rho^2}$$



$$V_3(\rho, \varphi) = \frac{100\cos^2(4\varphi)}{\rho^2}$$



Список литературы

[1] Яковенко Г. Н., "Лекции по теоретической механике": М.: МФТИ, 1998

[2] Ашкрофт Н. У., Мермин Н. Д. "Физика твердого тела. Том 1": М.: Мир, 1979

[3] Лифшиц Е. М. Питаевский Л. П. "Теоретическая физика. Том 9. Статистическая физика. Часть II. Теория конденсированного состояния": М.: Наука, 1978

[4] Исаев А. П., Рубаков В. А. "Теория групп и симметрий"

[5] Абрамов А. А.,Андреев В. Б. "О применении метода прогонки к нахождению периодических решений дифференциальных и разностных уравнений": Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1963, том 3, номер 2, 377–381