KSN — III FK — zadanie 8.1

Wektory i wartości własne

Typowym probelmem własnym w fizyce jest poszukiwanie rozwiązanie równania Schrödingera będącego równaniem własnym operatora energii:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \tag{1}$$

gdzie $V(\mathbf{r})$ — jest energią potencjalną, $\psi(\mathbf{r})$ — funkcją falową zaś E — energią odpowiadającą funkcji $\psi(\mathbf{r})$. Spróbujmy znaleźć poziomy energii i odpowiadające im funkcje falowe dla cząstki o masie m umieszczonej w potencjale jednowymiarowego oscylatora harmonicznego $V(x) = kx^2/2$. Jeśli za jednostkę energii przyjmiemy $\hbar\omega$ (gdzie $\omega^2 = k/m$) a jednostkę długości $\sqrt{\hbar/m\omega}$ to równanie (1) przyjmie postać:

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{1}{2}x^2\psi(x) = E\psi(x). \tag{2}$$

Zastępując drugą pochodną po lewej stronie równania ilorazem różnicowym:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}(x = x_i) \approx \frac{\psi(x_{i+1}) - 2\psi(x_i) + \psi(x_{i-1})}{(\Delta x)^2}$$

możemy ustawić równanie iteracyjne na $\psi_i = \psi(x_i)$

$$-\frac{1}{2}\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}x_i^2\psi_i = E\psi_i, \tag{3}$$

i żądając zerowania się funkcji falowej $\psi(x)$ w nieskończonościach $\psi(x = -L \to -\infty) = \psi_0 = 0$ i $\psi(x = +L \to +\infty) = \psi_N = 0$ równanie (3) można przedstawić w postaci macierzowej jako:

$$\begin{pmatrix}
h_{1,1} & h_{1,2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
h_{2,1} & h_{2,2} & h_{2,3} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & h_{3,2} & h_{3,3} & h_{3,4} & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 & & & & \vdots & & & & \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & h_{N-3,N-4} & h_{N-3,N-3} & h_{N-3,N-2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{N-2,N-3} & h_{N-2,N-2} & h_{N-2,N-1} \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & h_{N-1,N-2} & h_{N-1,N-1}
\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-3} \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-3} \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}, \tag{4}$$

gdzie $h_{i,i-1} = h_{i-1,i} = -1/[2(\Delta x)^2]$ dla $i = 2, \ldots, N-1$, $h_{i,i} = (\Delta x)^{-2} + x_i^2/2$, $x_i = -L + i\Delta x$ dla $i = 1, \ldots, N-1$ oraz $\Delta x = 2L/N$.

Macierz hamiltonianu jest więc nie tylko rzeczywistą i symetryczną ale i trójprzekątniową. Korzystając z tego faktu proszę znaleźć jej wektory i wartości własne.

Na wspólnym wykresie proszę nanieść pięć *pierwszych* funkcji falowych w przedziale $x \in [-L; +L]$. Proszę podać odpowiadające im energie. W obu przypadkach proszę porównać otrzymany wynik z wynikami analitycznymi.

Krzysztof Malarz, Kraków, 4 grudnia 2006