Mekanika kuantikoa praktikan jartzen

Ion Mitxelena, David de Sancho, Txema Mercero eta Xabier Lopez

2019/11/12

Problema analitikotik numerikora

Orokorrean ezin dugu Schrodinger-en ekuazioa eskuz ebatzi, hortaz metodo numerikoak erabili behar ditugu

Problema orokorra

Orokorrean ezin dugu Schrodinger-en ekuazioa eskuz ebatzi, hortaz metodo numerikoak erabili behar ditugu

- Partikula kaxa batean

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi \longrightarrow \Psi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x)\,;\ 0 \leq x \leq L$$

Problema orokorra

Orokorrean ezin dugu Schrodinger-en ekuazioa eskuz ebatzi, hortaz metodo numerikoak erabili behar ditugu

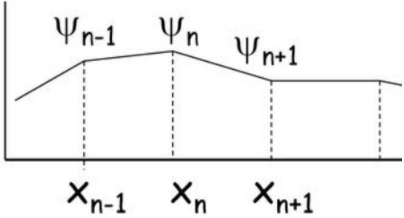
- Partikula kaxa batean

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi \longrightarrow \Psi''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}\Psi(x);\ 0 \leq x \leq L$$

- Orokorrean

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = \left(-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(x)\right)\Psi = E\Psi \longrightarrow E, \Psi?$$

Zatituko dugu espazioa oso tarte txikietan:



$\Psi = [\psi_1(x_1), \psi_2(x_2), ..., \psi_L(x_L)]$ izanen da uhin-funtzio diskretizatua.

Diferentzia finituak ekuazioak numerikoki ebazteko

Normalean energia ondoko moduan lortzen dugu:

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi \longrightarrow E = \frac{\int \Psi^* \hat{\mathcal{H}} \Psi dx}{\int \Psi^* \Psi dx} = \int \Psi^* \hat{\mathcal{H}} \Psi dx$$

Normalean energia ondoko moduan lortzen dugu:

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = E\Psi \longrightarrow E = \frac{\int \Psi^* \hat{\mathcal{H}} \Psi dx}{\int \Psi^* \Psi dx} = \int \Psi^* \hat{\mathcal{H}} \Psi dx$$

baina orain problema guztia diskretizatu beharra dago.

Diferentzia finituak ekuazioak numerikoki ebazteko

$$\Psi = [\psi_1(x_1), \psi_2(x_2), ..., \psi_L(x_L)]$$

Hamiltondarra diskretizatuko dugu matrize moduan idatziz:

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = \left(\quad \hat{\mathcal{H}} \quad \right) \left[\; \Psi \; \right] = \left(\; E \; \right) \left[\; \Psi \; \right]$$

$$\hat{\mathcal{H}}\Psi = \left(\quad \hat{\mathcal{H}} \quad \right) \left[\; \Psi \; \right] = \left(\; E \; \right) \left[\; \Psi \; \right]$$

autobalore eta autofuntzioen problema ebatzi behar dugu, non $\Psi = [\psi_1(x_1), \psi_2(x_2), ..., \psi_L(x_L)]$ eta $E = [E_1, E_2, ..., E_L]$ dira Hamiltondarraren autofuntzioak eta autobaloreak.

Partikula kaxa batean:

$$\left(-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(x)\right)\Psi = E\Psi \text{ non eta } V(x) = \begin{cases} -D & -L \le x \le L \\ 0 & 0 \le x \\ 0 & x \le L \end{cases}$$

D putzuaren altuera da (ezin da ∞ definitu ordenadore batean!), eta falta zaigu ∇^2 deribatua diferentzia finituen metodoen moduan idaztea.

Partikula kaxa batean:

$$\left(-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(x)\right)\Psi = E\Psi \text{ non eta } V(x) = \begin{cases} -D & -L \leq x \leq L \\ 0 & 0 \leq x \\ 0 & x \leq L \end{cases}$$

D putzuaren altuera da (ezin da ∞ definitu ordenadore batean!), eta falta zaigu ∇^2 deribatua diferentzia finituen metodoen moduan idaztea.

Taylor-en metodoa:

$$f(x+h) = f(x) + f'(x) * h + \frac{1}{2} f''(x) * h^2 + ...; \; h \to 0$$

Partikula kaxa batean:

$$\left(-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2 + V(x)\right)\Psi = E\Psi \text{ non eta } V(x) = \begin{cases} -D & -L \leq x \leq L \\ 0 & L \leq x \\ 0 & x \leq -L \end{cases}$$

D putzuaren altuera da (ezin da ∞ definitu ordenadore batean!), eta falta zaigu ∇^2 deribatua diferentzia finituen metodoen moduan idaztea.

Taylor-en metodoa:

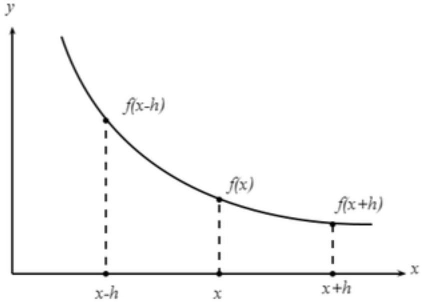
$$f(x+h) \approx f(x) + f'(x) * h + \frac{1}{2} f''(x) * h^2$$
$$f(x-h) \approx f(x) - f'(x) * h + \frac{1}{2} f''(x) * h^2$$

Taylor-en metodoa:

$$f(x+h) \approx f(x) + f'(x) * h + \frac{1}{2} f''(x) * h^2$$

$$f(x-h) \approx f(x) - f'(x) * h + \frac{1}{2} f''(x) * h^2$$

$$\Longrightarrow f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{2h^2}$$



Partikula kaxa batean

∇^2 operadorea ondoko matrize eran adieraziko dugu, x_n definitutako puntu guztietan

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & & \\ & 1 & -2 & 1 & & & \\ & & 1 & -2 & 1 & & \\ & & & 1 & -2 & 1 & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{2h^2}$$

Partikula kaxa batean

∇^2 operadorea ondoko matrize eran adieraziko dugu, x_n definitutako puntu guztietan

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & & & & & \\ 1 & -2 & 1 & & & & \\ & 1 & -2 & 1 & & & \\ & & 1 & -2 & 1 & & \\ & & & 1 & -2 & 1 & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & & 1 & -2 \end{bmatrix}$$

V(x) delakoa matrize diagonala da, diagonalean ondoko balioak dituelarik: 0 eta -D

Ariketa

'Partikula altuera finituko kaxa batean' edo 'Putzu potentziala'

Programa: JUPYTER NOTEBOOK

Galderak

1. Nola aldatzen dira energia mailak putzuaren altuerarekin ?
2. Nola aldatzen dira uhin funtzioak putzuaren altuerarekin ?
3. Zein da diferentzia nabarmenena atzoko adibidearekin ?