Univerza v Ljubljani
Fakulteta za matematiko in fiziko

Oddelek za fiziko

1. naloga: Numerično reševanje Schrodingerjeve enačbe -2.del

Poročilo pri predmetu višje računske metode

2016/2017

Avtor:
Klemen Rahne
28152028

6. marec 2017

1 Lastne energije

Iščemo lastne energije kvantnega sistema v harmonskem potencialu z dodatnim anharmonskim členom. Tak sistem bomo reševali v bazi ($\Phi_N(x)$) rešitev nezmotenega harmonskega oscilatorja, ki ima za bazo nasljednje funkcije:

$$\Phi_N(x) = \frac{1}{\pi^{\frac{1}{4}}\sqrt{2^N N!}} H_N(x) \exp\left\{(\frac{-x^2}{2})\right\} \tag{1.1}$$

kjer je H_N Hermitov polinom N-te stopnje. Za iskanje lastnih energij harmonskega oscilatorja z dodatnim anharmonskim členom imamo Schroedingerjevo enačbo:

$$\hat{H}\Psi_N = E_N \Psi_N \tag{1.2}$$

Hamiltonov operator lahko zapišemo kot vsoto Hamiltonovega operatorja harmonskega oscilatorja in prispevek anharmonskega člena potenciala:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda \hat{H}' \tag{1.3}$$

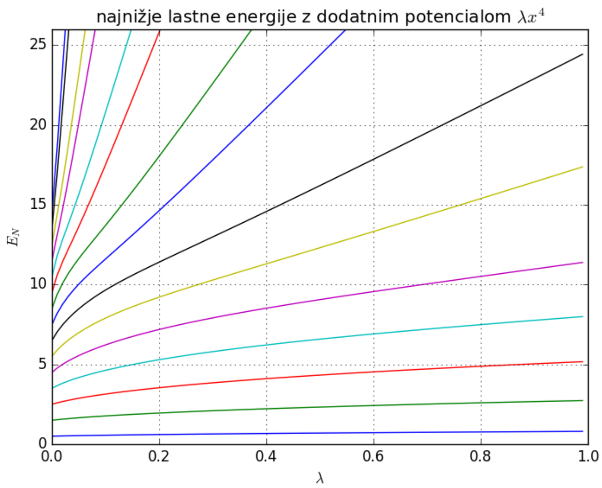
rešitve samo operatorja H_0, katere bomo uporabljali kot bazne funkcije so funkcije 1.1. Z uporabo nastavka:

$$\Psi(x) = \sum_0^N c_N \Phi_N(x) \tag{1.4}$$

Z uporabo variacijskega pristopa se enačba 1.2 prepiše na problem iskanja lastne vrednosti matrike H, ki ima na mestu i, j naslednjo vrednosti:

$$H_{i,j} = \langle i | \hat{H} | j \rangle = \langle i | \hat{H}_0 | j \rangle + \lambda \langle i | \hat{H}' | j \rangle = (i + \frac{1}{2})\delta_{i,j} + \lambda \langle i | x^4 | j \rangle; \quad i = 0, 1, .., N-1$$

Dodatni člen$\langle i | x^4 | j \rangle$, matriki H, doda izven diagonalne elemente.

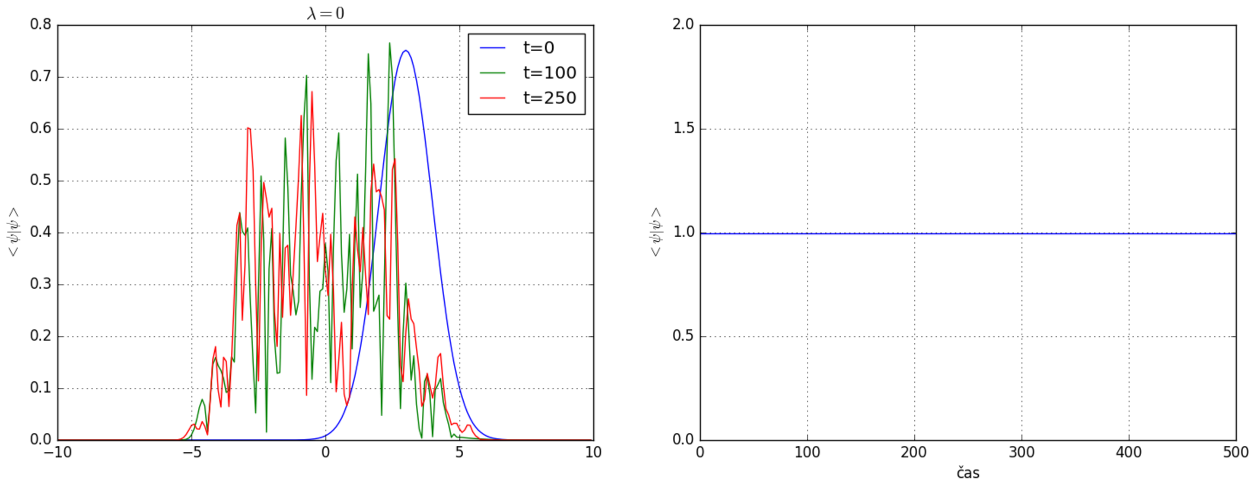


Slika 1.1: Najnižje lastne energije v odvisnosti od λ. Velikost matrike je bilo $15x15$.

Poglejmo kako vpliva velikost matrike na vrednosti lastnih energij.

2 naloga

Oglejmo si kako izgleda če osnosvno valovno funkcijo zamaknemo za razdaljo a. Pričakovati je, da se valovna funkcija šele po nekaj korakih stabilizirala okoli izhodišča potenciala.



Slika 2.1: Na levem grafu vidimo časovni potek valovne funkcije po času. Na začetku je funkcija zelo jasno določena, kasneje se pa gaussova oblika žamaže". Na desnem grafu vidimo, da se kljub zamazanosti gausove krivulje ohranja verjetnostna gostota.