

Тема 5. АЛГОРИТМ И ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ РАСЧЕТА СТАЦИОНАРНЫХ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ ЧАСТИЦЫ В ОДНОМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ С БЕСКОНЕЧНЫМИ СТЕНКАМИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛОЖЕНИЯ ИСКОМОЙ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ ПО БАЗИСУ.

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x); \quad \psi(x) \equiv \widetilde{\Psi}(x); \quad (1)$$

$$\hat{H}^0 \varphi_k(x) = E_k^0 \varphi_k(x). \quad \downarrow \quad \{\varphi_k(x)\} \quad (2)$$

$$(3) \quad \psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \varphi_k(x). \quad k=0; \text{ осн. сост.}$$

$$\varphi_m^*(x) \left| \hat{H} \sum_{k=0}^{\infty} C_k \varphi_k(x) = E \sum_{k=0}^{\infty} C_k \varphi_k(x); \right.$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} C_k \int \varphi_m^*(x) \hat{H} \varphi_k(x) dx = E \sum_{k=0}^{\infty} C_k \underbrace{\int \varphi_m^*(x) \varphi_k(x) dx}_{\delta_{mk}};$$

Тема 5. АЛГОРИТМ И ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ РАСЧЕТА СТАЦИОНАРНЫХ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ ЧАСТИЦЫ В ОДНОМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ С БЕСКОНЕЧНЫМИ СТЕНКАМИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛОЖЕНИЯ ИСКОМОЙ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ ПО БАЗИСУ.

$$\langle \psi_m | \hat{H} | \psi_n \rangle = \langle m | \hat{H} | n \rangle = \int \psi_m^*(x) \hat{H} \psi_n(x) dx = H_{mk};$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} H_{mk} C_k = E \sum_{k=0}^{\infty} C_k \delta_{mk}; \quad m, k = 0 \div \infty$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} H_{mk} C_k = E C_m; \quad m = 0 \div \infty;$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} (H_{mk} - E \delta_{mk}) C_k = 0;$$

$$\sum_{k=0}^n (H_{mk} - E \delta_{mk}) C_k = 0, \quad \text{прибл.}$$

$m, k = 0 \div n+1$

$$H = \sum_{k=0}^n \text{diag}(E_0, E_1, \dots, E_n);$$

Тема 5. АЛГОРИТМ И ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ РАСЧЕТА СТАЦИОНАРНЫХ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ ЧАСТИЦЫ В ОДНОМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ С БЕСКОНЕЧНЫМИ СТЕНКАМИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛОЖЕНИЯ ИСКОМОЙ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ ПО БАЗИСУ.

$$(H - E \cdot I)C = 0.$$

$$(n+1) \times (n+1) \begin{pmatrix} E_0 & & 0 \\ & E_1 & \\ 0 & & \ddots \\ & & & E_n \end{pmatrix}$$

$$H = \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} & \dots & H_{0n} \\ H_{10} & H_{11} & \dots & H_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n0} & H_{n1} & \dots & H_{nn} \end{pmatrix};$$

$$I = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ 0 & & \ddots \\ & & & 1 \end{pmatrix}.$$

$$C = \begin{pmatrix} C_{00} & C_{01} & \dots & C_{0n} \\ C_{10} & C_{11} & \dots & C_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{n0} & C_{n1} & \dots & C_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boxed{\begin{matrix} C_0^{(0)} \\ C_1^{(0)} \\ \vdots \\ C_n^{(0)} \end{matrix}} & \begin{matrix} C_0^{(1)} \\ C_1^{(1)} \\ \vdots \\ C_n^{(1)} \end{matrix} & \dots & \begin{matrix} C_0^{(n)} \\ C_1^{(n)} \\ \vdots \\ C_n^{(n)} \end{matrix} \end{pmatrix};$$

Тема 5. АЛГОРИТМ И ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ РАСЧЕТА СТАЦИОНАРНЫХ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ ЧАСТИЦЫ В ОДНОМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ С БЕСКОНЕЧНЫМИ СТЕНКАМИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РАЗЛОЖЕНИЯ ИСКОМОЙ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ ПО БАЗИСУ.

$$H \begin{bmatrix} C^{(k)} \end{bmatrix} = E_k \begin{bmatrix} C^{(k)} \end{bmatrix} ; \quad k = 0, \dots, n$$

$$\begin{cases} E_0 \\ \psi_0(x) = \sum_{k=0}^n C_k^{(0)} \varphi_k(x) \end{cases}$$

$$\int |\psi_0(x)|^2 dx = 1.$$