Metody numeryczne — zadanie 8.5
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 jednowymiarowej nieskończonej studni potencjału

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \Leftrightarrow |x| \le a, \\ \infty & \Leftrightarrow |x| > a. \end{cases}$$

Przyjmując wygodne jednostki $\hbar = m = 1$ równanie (1) przyjmie postać:

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

Zastępując drugą pochodną po lewej stronie równania pięciopunktowym ilorazem różnicowym:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}(x = x_i) \approx \frac{-\psi(x_{i+2}) + 16\psi(x_{i+1}) - 30\psi(x_i) + 16\psi(x_{i-1}) - \psi(x_{x-2})}{12(\Delta x)^2} + \mathcal{O}((\Delta x)^4)$$

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

$$-\frac{1}{2}\frac{-\psi_{i+2} + 16\psi_{i+1} - 30\psi_i + 16\psi_{i-1} - \psi_{i-2}}{12(\Delta x)^2} = E\psi_i, \tag{3}$$

i żądając zerowania się funkcji falowej $\psi(x)$ na brzegach studni ($\psi(x = -a) = \psi_0 = 0$ i $\psi(x = +a) = \psi_N = 0$) oraz poza nią ($\psi(x = -a - \Delta x) = \psi_{-1} = 0$ i $\psi(x = +a + \Delta x) = \psi_{N+1} = 0$) równanie (3) można przedstawić w postaci macierzowej jako:

$$\begin{pmatrix}
h_{1,1} & h_{1,2} & h_{1,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
h_{2,1} & h_{2,2} & h_{2,3} & h_{2,4} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
h_{3,1} & h_{3,2} & h_{3,3} & h_{3,4} & h_{3,5} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
0 & h_{4,2} & h_{4,3} & h_{4,4} & h_{4,5} & h_{4,6} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & h_{N-2,N-4} & h_{N-2,N-3} & h_{N-2,N-2} & h_{N-2,N-1} \\
0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & h_{N-1,N-3} & h_{N-1,N-2} & h_{N-1,N-1}
\end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \vdots \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \vdots \\ \psi_{N-2} \\ \psi_{N-1} \end{pmatrix}, \tag{4}$$

gdzie $\Delta x = 2a/N$ oraz

- $h_{i,i+2} = h_{i,i-2} = \dfrac{1}{24(\Delta x)^2}$ dla $i = 3, \ldots, N-3$,
- $h_{i,i+1} = h_{i,i-1} = -\dfrac{2}{3(\Delta x)^2}$ dla $i = 2, \ldots, N-2$,
- $h_{i,i} = \dfrac{5}{4(\Delta x)^2}$, $x_i = -a + i\Delta x$ dla $i = 1, \ldots, N-1$.

Proszę znaleźć wektory wektory i wartości własne macierzy Hamiltona h_{ij} korzystając z metody Jacobiego.

Na wspólnym wykresie proszę nanieść pięć *pierwszych* funkcji falowych w przedziale $x \in [-a; +a]$. Proszę podać odpowiadające im energie w odniesieniu do energii stanu podstawowego (o najniższej energii) E_0.

W obu przypadkach proszę porównać otrzymany wynik z wynikami analitycznymi.

Krzysztof Malarz, Kraków, 17 listopada 2016