Metody numeryczne w fizyce

W11OPA-SM0060G
rok akademicki 2023/24
semestr letni

Wykład 10

Karol Tarnowski
karol.tarnowski@pwr.edu.pl
L-1 p. 220

Plan wykładu

- Jednowymiarowe równanie Schrödingera
  - postać bezwymiarowa
  - dyskretyzacja
  - algebraiczne zagadnienie własne
- Kwantowy oscylator harmoniczny
- Wyznaczanie wartości własnych i funkcji własnych
  - metoda Martina-Deana
  - metoda DWSZ

Politechnika Wrocławska

Jednowymiarowe równanie Schrödingera

stała Diraca

potencjał

energia własna

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dX^2}+V(X)\right]\Psi(X)=\mathcal{E}\Psi(X)$$

masa cząstki

położenie

funkcja falowa

Politechnika Wrocławska

Postać bezwymiarowa

$$X = L_c x$$

$$V(X) = V_c v(x)$$

$$\mathcal{E} = V_c \varepsilon$$

$$\Psi(X) = \frac{1}{\sqrt{L_c}} \psi(x)$$

$$\left[-\frac{1}{L_c^2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2MV_c}{\hbar^2} v(x) \right] \psi(x) = \frac{2MV_c}{\hbar^2} \varepsilon \psi(x)$$

Politechnika Wrocławska

Postać bezwymiarowa

$$\left[-\frac{1}{L_c^2}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{2MV_c}{\hbar^2}v(x)\right]\psi(x)=\frac{2MV_c}{\hbar^2}\varepsilon\psi(x)$$

$$\alpha=\frac{2MV_cL_c^2}{\hbar^2}$$

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2}+\alpha v(x)\right]\psi(x)=\alpha\varepsilon\psi(x)$$

Politechnika Wrocławska

Dyskretyzacja

- Siatka punktów na przedziale $\left[A,B\right]$

$$A = L_c a$$

$$B = L_c b$$

$$X_i = A + i\frac{B-A}{n+1} = A + iS$$

$$x_i = a + i\frac{b-a}{n+1} = a + is$$

$$i \in \left[0, n+1\right]$$

Dyskretyzacja

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2}+\alpha v(x)\right]\psi(x)=\alpha\varepsilon\psi(x)$$

- Przybliżenie trójpunktowe drugiej pochodnej

$$\left.\frac{d^2\psi}{dx^2}\right|_{x=x_i}=\frac{\psi_{i+1}-2\psi_i+\psi_{i-1}}{s^2}+O\left(s^2\right)\qquad i\in[1,n]$$

$$-\psi_{i-1}+\left(2+s^2\alpha v_i\right)\psi_i-\psi_{i+1}=s^2\alpha\varepsilon\psi_i$$

$$-\psi_{i-1}+\left(2+\tilde{v}_i\right)\psi_i-\psi_{i+1}=\tilde{\varepsilon}\psi_i$$

$$\psi_a=\psi_0=0\qquad\qquad \psi_b=\psi_{n+1}=0$$

Politechnika Wrocławska

Algebraiczne zagadnienie własne

$$-\psi_{i-1} + \left(2 + \tilde{v}_i\right)\psi_i - \psi_{i+1} = \tilde{\varepsilon}\psi_i$$

$$\psi_0 = 0$$

$$\begin{bmatrix} 2+\tilde{v}_1 & -1 & & & \\ -1 & 2+\tilde{v}_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 2+\tilde{v}_{n-1} & -1 \\ & & & -1 & 2+\tilde{v}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{bmatrix} = \tilde{\varepsilon} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{bmatrix}$$

$$\psi_{n+1} = 0$$

Politechnika Wrocławska

Kwantowy oscylator harmoniczny

$$V(X) = \frac{1}{2}KX^2 = \frac{1}{2}M\Omega^2X^2, \text{ gdzie } \Omega = \sqrt{\frac{K}{M}}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dX^2} + \frac{1}{2}M\Omega^2X^2\right]\Psi(X) = \mathcal{E}\Psi(X)$$

$$\mathcal{E}_n = \hbar\Omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad \text{gdzie } n = 0,1,2,\ldots$$

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{M\Omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{M\Omega X^2}{2\hbar}\right)H_n\left(\sqrt{\frac{M\Omega}{\hbar}}X\right)$$

Politechnika Wrocławska

Kwantowy oscylator harmoniczny

$$V(X)=\frac{1}{2}KX^2=\frac{1}{2}M\Omega^2X^2,\ \text{gdzie}\ \Omega=\sqrt{\frac{K}{M}}$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dX^2}+\frac{1}{2}M\Omega^2X^2\right]\Psi(X)=\mathcal{E}\Psi(X)$$

$$L_c=\sqrt{\frac{\hbar}{M\Omega}}$$

$$-\psi_{i-1}+\left(2+s^2v_i\right)\psi_i-\psi_{i+1}=s^2\varepsilon\psi_i$$

$$V_c=\frac{1}{2}\hbar\Omega$$

$$v_i=x_i^2$$

Politechnika Wrocławska

Kwantowy oscylator harmoniczny

$$\begin{bmatrix} 2+s^2x_1^2 & -1 & & & \\ -1 & 2+s^2x_2^2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 2+s^2x_{n-1}^2 & -1 \\ & & & -1 & 2+s^2x_n^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{bmatrix} = \tilde{\varepsilon} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{bmatrix}$$

Metoda Martina-Deana

- Dla macierzy trójprzekątniowej i symetrycznej

$$T = \begin{bmatrix} d_1 & e_1 & & & \\ e_1 & d_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & d_{n-1} & e_{n-1} \\ & & & e_{n-1} & d_n \end{bmatrix}$$

liczba wartości własnych mniejszych od z równa jest liczbie ujemnych wyrazów w ciągu liczbowym

$$u_1 = d_1 - z, \quad u_i = d_i - z - \frac{e_{i-1}^2}{u_{i-1}} \quad \text{dla } i = 2,\ldots,n$$

Metoda Martina-Deana

- Liczba wartości własnych *T* mniejszych od *z* jest funkcją przedziałami stałą, niemalejącą, o wartościach naturalnych
- Funkcja ta doznaje skoku dla z równego wartości własnej
- Poszukiwanie wartości własnych można przeprowadzić modyfikując metodę połowienia

Metoda DWSZ

- Metoda DWSZ pozwala wyznaczyć wektor własny odpowiadający zadanej wartości własnej

$$
\begin{bmatrix}
d_1 - \tilde{\varepsilon} & e_1 & & & \\
e_1 & d_2 - \tilde{\varepsilon} & \ddots & & \\
& \ddots & \ddots & \ddots & \\
& & \ddots & d_{n-1} - \tilde{\varepsilon} & e_{n-1} \\
& & & e_{n-1} & d_n - \tilde{\varepsilon}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n
\end{bmatrix}
= 0
$$

Politechnika Wrocławska

Podstawianie w przód

$$\psi_1 = 1$$

$$(d_1 - \tilde{\varepsilon})\psi_1 + e_1\psi_2 = 0$$

$$\psi_2 = -(d_1 - \tilde{\varepsilon})/e_1$$

$$e_1\psi_1 + (d_2 - \tilde{\varepsilon})\psi_2 + e_2\psi_3 = 0$$

$$\psi_3 = -\left[e_1\psi_1 + (d_2 - \tilde{\varepsilon})\psi_2\right]/e_2$$

$$e_{i-2}\psi_{i-2} + (d_{i-1} - \tilde{\varepsilon})\psi_{i-1} + e_{i-1}\psi_i = 0$$

$$\psi_i = -\left[e_{i-2}\psi_{i-2} + (d_{i-1} - \tilde{\varepsilon})\psi_{i-1}\right]/e_{i-1}, \quad \text{dla } i = 3,\ldots,n$$

Politechnika Wrocławska

Podstawianie w przód

$$\psi_1 = 1$$

$$\left(d_1 - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_1 + e_1\psi_2 = 0$$

$$\psi_2 = -\left(d_1 - \tilde{\varepsilon}\right)/e_1$$

$$\left|e_{n-1}\psi_{n-1} + \left(d_n - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_n\right| < \sigma$$

$$e_1\psi_1 + \left(d_2 - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_2 + e_2\psi_3 = 0$$

$$\psi_3 = -\left[e_1\psi_1 + \left(d_2 - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_2\right]/e_2$$

$$e_{i-2}\psi_{i-2} + \left(d_{i-1} - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_{i-1} + e_{i-1}\psi_i = 0$$

$$\psi_i = -\left[e_{i-2}\psi_{i-2} + \left(d_{i-1} - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_{i-1}\right]/e_{i-1}, \quad \text{dla } i = 3,\ldots,n$$

Politechnika Wrocławska

Podstawianie w tył

$$\psi_n = 1$$

$$e_{n-1}\psi_{n-1} + \left(d_n - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_n = 0$$

$$\psi_{n-1} = -\left(d_n - \tilde{\varepsilon}\right)/e_{n-1}$$

$$e_{n-2}\psi_{n-2} + \left(d_{n-1} - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_{n-1} + e_{n-1}\psi_n = 0$$

$$\psi_{n-2} = -\left[\left(d_{n-1} - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_{n-1} + e_{n-1}\psi_n\right]/e_{n-2}$$

$$e_i\psi_i + \left(d_{i+1} - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_{i+1} + e_{i+1}\psi_{i+2} = 0$$

$$\psi_i = -\left[\left(d_{i+1} - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_{i+1} + e_{i+1}\psi_{i+2}\right]/e_i$$

Politechnika Wrocławska

Podstawianie w tył

$$\psi_n = 1$$

$$e_{n-1}\psi_{n-1} + \left(d_n - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_n = 0$$

$$\psi_{n-1} = -\left(d_n - \tilde{\varepsilon}\right)/e_{n-1}$$

$$\left|e_1\psi_2 + \left(d_1 - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_1\right| < \sigma$$

$$e_{n-2}\psi_{n-2} + \left(d_{n-1} - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_{n-1} + e_{n-1}\psi_n = 0$$

$$\psi_{n-2} = -\left[\left(d_{n-1} - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_{n-1} + e_{n-1}\psi_n\right]/e_{n-2}$$

$$e_i\psi_i + \left(d_{i+1} - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_{i+1} + e_{i+1}\psi_{i+2} = 0$$

$$\psi_i = -\left[\left(d_{i+1} - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_{i+1} + e_{i+1}\psi_{i+2}\right]/e_i$$

Politechnika Wrocławska

Metoda DWSZ

- Wybierzmy k-te równanie z macierzy

$$\begin{bmatrix} d_1-\tilde{\varepsilon} & e_1 & & & \\ e_1 & d_2-\tilde{\varepsilon} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & d_{k-2}-\tilde{\varepsilon} & e_{k-2} \\ & & & e_{k-2} & d_{k-1}-\tilde{\varepsilon} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{k-2} \\ \psi_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -e_{k-1}\psi_k \end{bmatrix}$$

$$e_{k-1}\psi_{k-1} + \left(d_k - \tilde{\varepsilon}\right)\psi_k + e_k\psi_{k-1} = 0$$

$$\begin{bmatrix} d_{k+1}-\tilde{\varepsilon} & e_{k+1} & & & \\ e_{k+1} & d_{k+2}-\tilde{\varepsilon} & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & d_{n-1}-\tilde{\varepsilon} & e_{n-1} \\ & & & e_{n-1} & d_n-\tilde{\varepsilon} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{k+1} \\ \psi_{k+2} \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -e_k\psi_k \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Metoda DWSZ

$$\psi_2 = -e_1 \underbrace{\left(d_2 - \tilde{\varepsilon} - e_2^2 \Theta_3^+\right)^{-1}}_{\Theta_2^+} \psi_1$$

$$\vdots$$

$$\psi_k = -e_{k-1} \underbrace{\left(d_k - \tilde{\varepsilon} - e_k^2 \Theta_{k+1}^+\right)^{-1}}_{\Theta_k^+} \psi_{k-1}$$

$$\psi_{k+1} = -e_k \underbrace{\left(d_{k+1} - \tilde{\varepsilon} - e_{k+1}^2 \Theta_{k+2}^+\right)^{-1}}_{\Theta_{k+1}^+} \psi_k$$

$$\vdots$$

$$\psi_{n-1} = -e_{n-2} \underbrace{\left(d_{n-1} - \tilde{\varepsilon} - e_{n-1}^2 \Theta_n^+\right)^{-1}}_{\Theta_{n-1}^+} \psi_{n-2}$$

$$\psi_n = -e_{n-1} \underbrace{\left(d_n - \tilde{\varepsilon}\right)^{-1}}_{\Theta_n^+} \psi_{n-1}$$

Politechnika Wrocławska

Metoda DWSZ

$$\psi_2 = -e_1 \underbrace{\left(d_2 - \tilde{\varepsilon} - e_2^2 \Theta_3^+\right)^{-1}}_{\Theta_2^+} \psi_1$$

$$\vdots$$

$$\psi_k = -e_{k-1} \underbrace{\left(d_k - \tilde{\varepsilon} - e_k^2 \Theta_{k+1}^+\right)^{-1}}_{\Theta_k^+} \psi_{k-1}$$

$$\psi_{k+1} = -e_k \underbrace{\left(d_{k+1} - \tilde{\varepsilon} - e_{k+1}^2 \Theta_{k+2}^+\right)^{-1}}_{\Theta_{k+1}^+} \psi_k$$

$$\vdots$$

$$\psi_{n-1} = -e_{n-2} \underbrace{\left(d_{n-1} - \tilde{\varepsilon} - e_{n-1}^2 \Theta_n^+\right)^{-1}}_{\Theta_{n-1}^+} \psi_{n-2}$$

$$\psi_n = -e_{n-1} \underbrace{\left(d_n - \tilde{\varepsilon}\right)^{-1}}_{\Theta_n^+} \psi_{n-1}$$

$$\Theta_n^+ = \left(d_n - \tilde{\varepsilon}\right)^{-1}$$

$$\Theta_i^+ = \left(d_i - \tilde{\varepsilon} - e_i^2 \Theta_{i+1}^+\right)^{-1} \quad \text{dla } i = n-1,\ldots,2$$

Politechnika Wrocławska

Metoda DWSZ

$$\psi_1 = -e_1 \underbrace{\left(d_1 - \tilde{\varepsilon}\right)^{-1}}_{\Theta_1^-} \psi_2$$

$$\psi_2 = -e_2 \underbrace{\left(d_2 - \tilde{\varepsilon} + e_1^2 \Theta_1^-\right)^{-1}}_{\Theta_2^-} \psi_3 = 0$$

$$\vdots$$

$$\psi_{k-1} = -e_{k-1} \underbrace{\left(d_{k-1} - \tilde{\varepsilon} + e_{k-2}^2 \Theta_{k-2}^-\right)^{-1}}_{\Theta_{k-1}^-} \psi_k$$

$$\psi_k = -e_k \underbrace{\left(d_k - \tilde{\varepsilon} + e_{k-1}^2 \Theta_{k-1}^-\right)^{-1}}_{\Theta_k^-} \psi_{k+1}$$

$$\vdots$$

$$\psi_{n-1} = -e_{n-1} \underbrace{\left(d_{n-1} - \tilde{\varepsilon} + e_{n-2}^2 \Theta_{n-2}^-\right)^{-1}}_{\Theta_{n-1}^-} \psi_n$$

Politechnika Wrocławska

Metoda DWSZ

$$\psi_1 = -e_1 \underbrace{\left(d_1 - \tilde{\varepsilon}\right)^{-1}}_{\Theta_1^-} \psi_2$$

$$\Theta_1^- = \left(d_1 - \tilde{\varepsilon}\right)^{-1}$$

$$\Theta_i^- = \left(d_i - \tilde{\varepsilon} + e_{i-1}^2 \Theta_{i-1}^-\right)^{-1} \quad \text{dla } i = 2,\ldots,n-1$$

$$\psi_2 = -e_2 \underbrace{\left(d_2 - \tilde{\varepsilon} + e_1^2 \Theta_1^-\right)^{-1}}_{\Theta_2^-} \psi_3 = 0$$

$$\vdots$$

$$\psi_{k-1} = -e_{k-1} \underbrace{\left(d_{k-1} - \tilde{\varepsilon} + e_{k-2}^2 \Theta_{k-2}^-\right)^{-1}}_{\Theta_{k-1}^-} \psi_k$$

$$\psi_k = -e_k \underbrace{\left(d_k - \tilde{\varepsilon} + e_{k-1}^2 \Theta_{k-1}^-\right)^{-1}}_{\Theta_k^-} \psi_{k+1}$$

$$\vdots$$

$$\psi_{n-1} = -e_{n-1} \underbrace{\left(d_{n-1} - \tilde{\varepsilon} + e_{n-2}^2 \Theta_{n-2}^-\right)^{-1}}_{\Theta_{n-1}^-} \psi_n$$

Politechnika Wrocławska

Podsumowanie

- Jednowymiarowe równanie Schrödingera
- Kwantowy oscylator harmoniczny
- Wyznaczanie wartości własnych i funkcji własnych