



Politechnika
Wrocławska

Metody numeryczne w fizyce

W11OPA-SM0060G

rok akademicki 2024/25

semestr letni

Wykład 12

Karol Tarnowski

karol.tarnowski@pwr.edu.pl

L-1 p. 221



HR EXCELLENCE IN RESEARCH



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

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

Postać bezwymiarowa

$$X = L_c x$$

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

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

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

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

Postać bezwymiarowa

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

$$\alpha = \frac{2MV_c L_c^2}{\hbar^2}$$

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

Dyskretyzacja

- Siatka punktów na przedziale $[A, B]$

$$A = L_c a$$

$$B = L_c b$$

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

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

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

Dyskretyzacja

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

- Przybliżenie trójpunktowe drugiej pochodnej

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

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

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

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

Algebraiczne zagadnienie własne

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

$$\begin{matrix} & & & & & \psi_0 = 0 \\ & & & & & \left[\begin{array}{c} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{array} \right] \\ \left[\begin{array}{cccccc} 2 + \tilde{v}_1 & -1 & & & & \\ -1 & 2 + \tilde{v}_2 & \ddots & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & 2 + \tilde{v}_{n-1} & -1 & \\ & & & -1 & 2 + \tilde{v}_n & \end{array} \right] & = \tilde{\varepsilon} & \left[\begin{array}{c} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_{n-1} \\ \psi_n \end{array} \right] \\ & & & & & \psi_{n+1} = 0 \end{matrix}$$

Kwantowy oscylator harmoniczny

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

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

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

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

Kwantowy oscylator harmoniczny

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

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

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

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

$$-\psi_{i-1} + (2 + s^2 v_i) \psi_i - \psi_{i+1} = s^2 \mathcal{E} \psi_i$$

$$v_i = x_i^2$$

Kwantowy oscylator harmoniczny

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

Metoda Martina-Deana

- Dla macierzy trójkątnej 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

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

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

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

Podstawianie w przód

$$\psi_1 = 1$$

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

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

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

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

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

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

Podstawianie w przód

$$\psi_1 = 1$$

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

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

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

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

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

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

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

Podstawianie w tył

$$\psi_n = 1$$

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

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

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

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

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

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

Podstawianie w tył

$$\psi_n = 1$$

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

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

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

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

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

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

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

Metoda DWSZ

- Wybierzmy k-te równanie z macierzy

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

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

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

Metoda DWSZ

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

⋮

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

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

⋮

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

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

Metoda DWSZ

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

⋮

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

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

⋮

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

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

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

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

Metoda DWSZ

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

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

⋮

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

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

⋮

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

Metoda DWSZ

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

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

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

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

⋮

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

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

⋮

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

Podsumowanie

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