Komputerowe Symulacje Numeryczne

Jacek Mostowicz
15.I.2006

Równanie Schrödingera

Cel ćwiczenia:

Rozwiązanie dwoma metodami równania Schrödingera:

$$-\frac{\hbar}{2m}\nabla^2\Psi(\vec{r})+V(\vec{r})\Psi(\vec{r})=E\Psi(\vec{r})$$

gdzie $V(\vec{r})$ to energia potencjalna, $\Psi(\vec{r})$ to wektor falowy, zaś E energią odpowiadającą funkcji $\Psi(\vec{r})$.

Zadany problem:

Pierwszą metodą podejścia do problemu jest przedstawienie powyższego równania za pomocą równania macierzowego:

$$A\omega = E\omega$$

gdzie A to macierz hamiltonianu, ω wektorem własnym, a E wartością własną tego wektora.

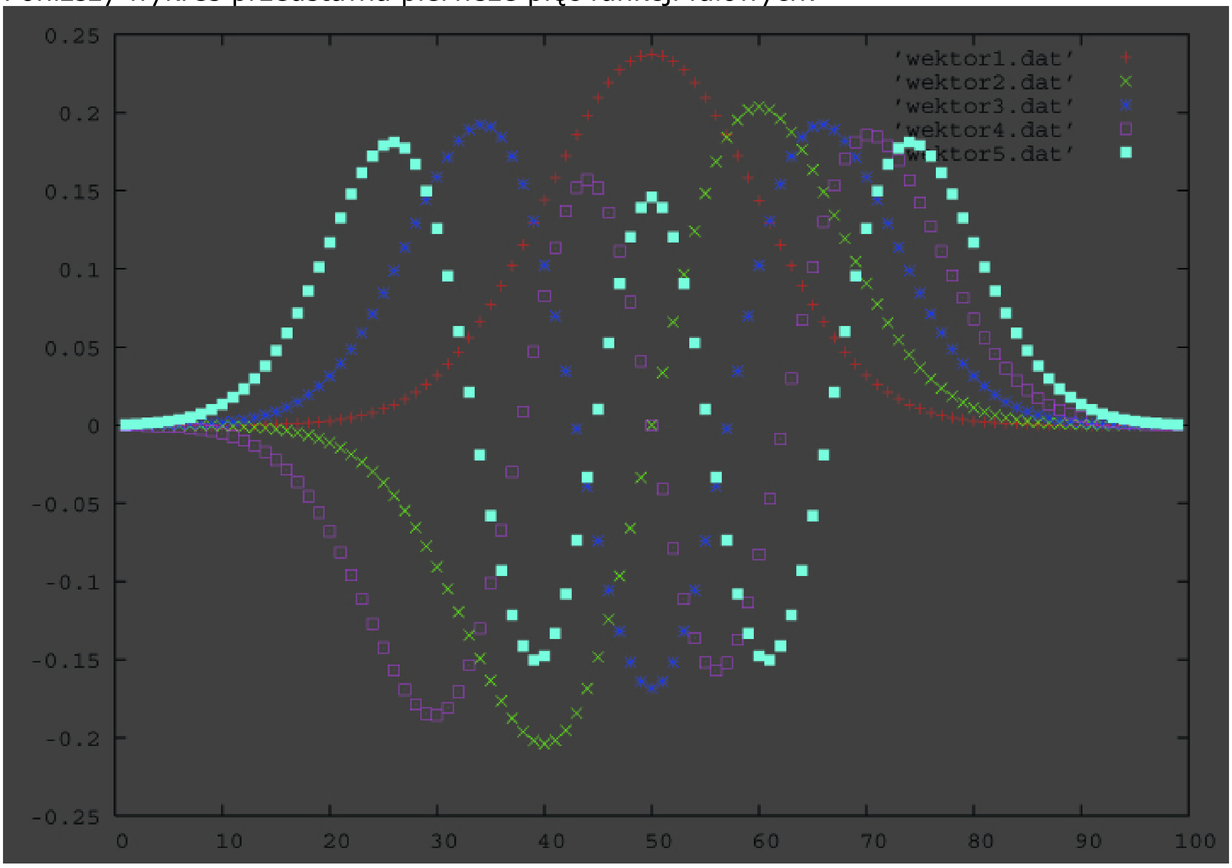
Druga metoda polegała na dyskretyzowaniu drugiej pochodnej:

$$f''(x) = \left(f(x+dx) + f(x-dx) - 2F(x) \right) / dx^2$$

I przedstawieniu równania Schrödingera w postaci iteracyjnej. Aby znaleźć wartość energii dla danego stanu należało wyznaczyć miejsce zerowe funkcji (metoda bisekcji i siecznych).

Rozwiązanie:

Poniższy wykres przedstawia pierwsze pięć funkcji falowych:



Szybko można zauważyć, że dla stanów parzystych funkcje falowe są parzyste, a dla stanów nieparzystych – nieparzyste.
Poniżej zamieszczono tabelę, w której zawarto zestawienie otrzymanych energii z wartościami teoretycznymi.

stan	wartość teoretyczna	wartość obliczona
0	0,5	0,499668598
1	1,5	1,49840271
2	2,5	2,49591303
3	3,5	3,49214292
4	4,5	4,48713303

Jednostką energii jest $\hbar\omega$, a wynika to ze wzoru, który posłużył do wyliczenia wartości teoretycznych:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

Druga część zadania polegała także na wyznaczeniu energii dla dwóch pierwszych stanów, ale innymi metodami (bisekcji i siecznych).
Po obliczeniach obie dały ten sam wynik:

$$E_0 = 0,503528716$$

$$E_1 = 1,49997672$$

Wnioski:

Obie metody różnią się przede wszystkim ilością wykonanych iteracji. Używając metody siecznych o wiele szybciej dostaniemy zadowalający wynik. Ilość iteracji nie przekroczyła 20 dla przedziału $[0,1]$ (stan podstawowy) kiedy jednocześnie dla metody bisekcji ilość wykonanych iteracji przekroczyła 30.

Należy dodać, że funkcja, dla której będzie się stosowało metodę siecznych i bisekcji nie może posiadać punktów nieosobliwych oraz drugiego miejsca zerowego w interesującym nas przedziale.