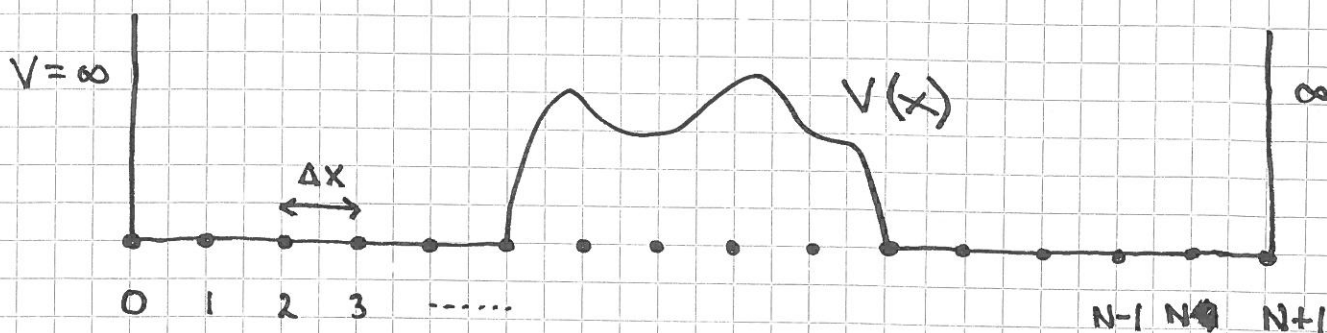


Numerisk løsning av TUSL

[En metode;
andre finnes!]

(N1)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$



$$\psi(0) = \psi_0 = 0, \quad \psi((N+1)\Delta x) = \psi_{N+1} = 0$$

$$\psi(n \cdot \Delta x) = \psi_n, \quad V(n \cdot \Delta x) = V_n$$

$$\begin{aligned} \psi_n'' &= \frac{\psi_{n+1/2}' - \psi_{n-1/2}'}{\Delta x} = \frac{\frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta x} - \frac{\psi_n - \psi_{n-1}}{\Delta x}}{\Delta x} \\ &= \frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m \Delta x^2} \psi_{n-1} + \left(\frac{\hbar^2}{m \Delta x^2} + V_n \right) \psi_n - \frac{\hbar^2}{2m \Delta x^2} \psi_{n+1} = E \psi_n$$

$$(n=1, 2, 3, \dots, N)$$

$$\Rightarrow \vec{H} \vec{\psi} = E \vec{\psi}; \quad \vec{H} = (N \times N)\text{-matrise med}$$

$$H_{nn} = \frac{\hbar^2}{m \Delta x^2} + V_n, \quad H_{n,n\pm 1} = -\frac{\hbar^2}{2m \Delta x^2}$$

~~resten~~ (resten av $H_{ij} = 0$)

$$\Rightarrow (H - E I) \vec{\Psi} = 0 \quad (I_{nn} = 1) \quad (N2)$$

Ikke-trivielle løsninger (dvs: $\vec{\Psi} \neq 0$) kun dersom

$$\det(H - E I) = 0$$

$$\Rightarrow N\text{-te-gradsligning, } c_N E^N + c_{N-1} E^{N-1} + \dots + c_0 = 0$$

med N løsninger $E_1, E_2, \dots, E_N$ som

er energieigenverdiene til TUSL.

Til hver E_j hører en eigenvektor $\vec{\Psi}_j$ som er bølgefunksjonen som hører til E_j ; bestemmes

ved å løse $(H - E_j I) \vec{\Psi}_j = 0$, og til

slutt normere ved å kreve $\int |\vec{\Psi}_j|^2 dx = 1$,

$$\text{dvs } \sum_{i=1}^N \Psi_j^{(i)*} \cdot \Psi_j^{(i)} \cdot \Delta x = 1.$$

Ser at H er symmetrisk (dvs $H_{n,n+1} = H_{n+1,n}$) og reell; har da reelle egenverdier E_j , og tilhørende egenvektorene $\vec{\Psi}_j$ kan også velges reelle, og ortogonale.

Standard egenverdiproblem, løses med `linalg.eigh(H)` i python: $w, v = \text{np.linalg.eigh}(H)$

$$\Rightarrow w[0] = E_1, w[1] = E_2, \dots, w[N-1] = E_N$$

kolonne nr 0 i $v = \vec{\Psi}_1, \dots$, kolonne nr $N-1$ i $v = \vec{\Psi}_N$
(dvs $v[:,0], \dots, v[:,N-1]$)