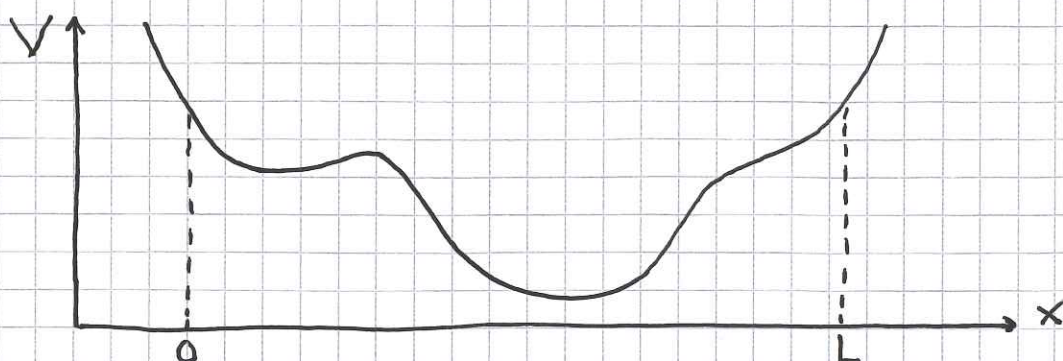


Numersk løsning av TUSL

Betrakter partikkel med masse m i vilkårlig potensial $V(x)$:



Ønsker å finne bundne tilstander med energier E tilstrekkelig mye mindre enn $V(0)$ og $V(L)$. Da er $|\psi| \approx 0$ for $x \leq 0$ og $x \geq L$, og vi gjør bare små feil ved å sette $V = \infty$, og dermed $\psi = 0$, for $x \leq 0$ og $x \geq L$.

Diskretisering: $x_n = n \cdot \Delta x$; $\Delta x = \frac{L}{N+1}$; $n = 0, 1, 2, \dots, N+1$
 $V_n = V(x_n)$; $V_0 = V_{N+1} = \infty$
 $\psi_n = \psi(x_n)$; $\psi_0 = \psi_{N+1} = 0$

$$\psi_n'' = \psi''(x_n) \approx \frac{\psi'(x_n + \frac{1}{2}\Delta x) - \psi'(x_n - \frac{1}{2}\Delta x)}{\Delta x}$$

$$\psi'(x_n + \frac{1}{2}\Delta x) \approx \frac{\psi(x_n + \Delta x) - \psi(x_n)}{\Delta x} = \frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta x}$$

$$\psi'(x_n - \frac{1}{2}\Delta x) \approx \frac{\psi(x_n) - \psi(x_n - \Delta x)}{\Delta x} = \frac{\psi_n - \psi_{n-1}}{\Delta x}$$

$$\Rightarrow \psi_n'' \approx \frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{(\Delta x)^2}$$

TUSL:

$$-\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \{ \psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1} \} + V_n \psi_n = E \psi_n ; n = 1, 2, \dots, N$$

Dvs N lign. for N ukjente, $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N$.

(36)

På matriseform: $\mathbb{H} \vec{\Psi} = E \vec{\Psi}$

med tridiagonal, reell og symmetrisk Hamiltonmatrise $\mathbb{H}$,

$$H_{nn} = \frac{\hbar^2}{m(\Delta x)^2} + V_n \quad (\text{diagonalen})$$

$$H_{n,n\pm 1} = -\frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} \quad (\text{over og under diagonalen})$$

Ikke-trivielle løsninger ($\vec{\Psi} \neq 0$) når

$$\det \{ \mathbb{H} - E \mathbb{1} \} = 0$$

$\nwarrow$ $N \times N$ enhetsmatrise

som gir N -gradsligning

$$a_N E^N + a_{N-1} E^{N-1} + \dots + a_1 E + a_0 = 0$$

med N energieigenverdier $E_1, E_2, \dots, E_N$ og tilhørende egenvektorer $\vec{\Psi}^{(1)}, \vec{\Psi}^{(2)}, \dots, \vec{\Psi}^{(N)}$

som bestemmes ved å løse ligningen

$$(\mathbb{H} - E_j \mathbb{1}) \vec{\Psi}^{(j)} = 0 \quad \text{for } j = 1, 2, \dots, N$$

i python f.eks. med `eigh_tridiagonal` fra `scipy`.

Gir N ortonormerte ^(reelle) bølgefunksjoner, dvs

$$\sum_{n=1}^N \psi_n^{(j)} \cdot \psi_n^{(k)} = \delta_{jk}$$

[se s. 34; sum over nedre indeks tilsvarende integral over x]

som vi kan utvikle en vilkårlig starttilstand i ,

$$\Psi(x_k, 0) = \Psi_k(0) = \sum_{j=1}^N c^{(j)} \psi_k^{(j)} \quad ; \quad k=1, 2, \dots, N$$

Koeffisientene fastlegges som på s. 34 :

$$\sum_k \psi_k^{(i)} \Psi_k(0) = \sum_j c^{(j)} \sum_k \psi_k^{(i)} \psi_k^{(j)} = \sum_j c^{(j)} \delta_{ij} = c^{(i)}$$

hvorefter vi kan studere tidsutviklingen,

$$\Psi_k(t) = \sum_j c^{(j)} \psi_k^{(j)} \exp(-i E_j t / \hbar) \quad [\text{som s. 34}]$$

og forventningsverdier som $\langle x \rangle(t)$ og $\langle p \rangle(t)$.

Fullstendighet

$$\Psi_k(0) = \sum_j c^{(j)} \psi_k^{(j)} \quad (*)$$

Ganger med $\psi_k^{(i)}$ og tar $\sum_k$:

$$\sum_k \psi_k^{(i)} \Psi_k(0) = \sum_j c^{(j)} \sum_k \psi_k^{(i)} \psi_k^{(j)} = \sum_j c^{(j)} \delta_{ij} = c^{(i)}$$

som innsatt i (*) gir

$$\Psi_k(0) = \sum_j \sum_l \psi_l^{(j)} \Psi_l(0) \psi_k^{(j)} = \sum_l \Psi_l(0) \sum_j \psi_l^{(j)} \psi_k^{(j)}$$

som for vilkårlig $\Psi_k(0)$ kun er oppfylt dersom

$$\sum_j \psi_l^{(j)} \psi_k^{(j)} = \delta_{lk}$$

Dette kalles fullstendighetsrelasjonen, og $\{\psi^{(j)}\}$ sies å danne et fullstendig sett.