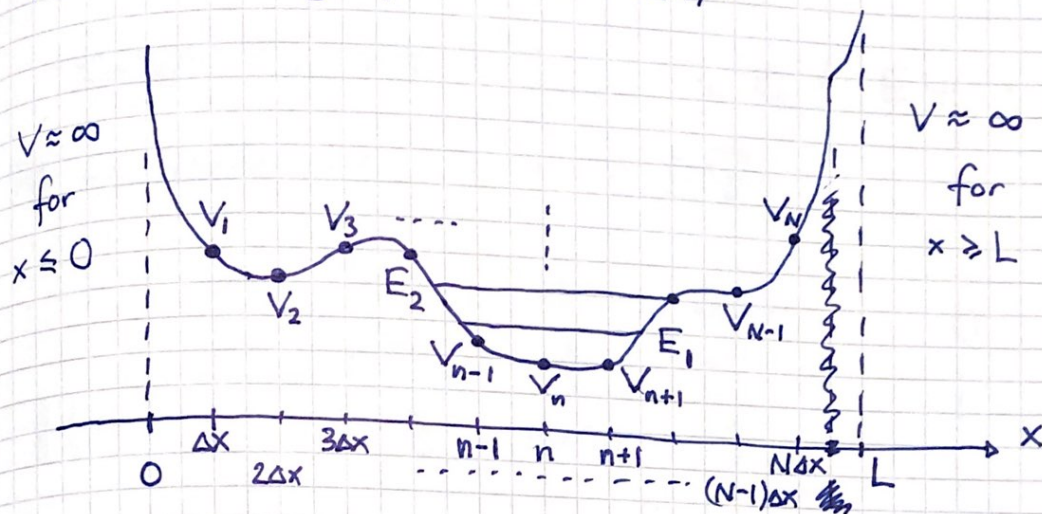


Numerisk løsning av TUSL

(42)

Anta "vilkårlig" potensial $V(x)$:



For tilstander med $E_j \ll V(0)$ og $V(L)$ kan vi med god tilnærming sette $\psi_j(x) = 0$ og $V(x) = \infty$ utenfor intervallet $(0, L)$.

Diskretisering:

$$\Delta x = \frac{L}{N+1}; \quad x_n = n \cdot \Delta x; \quad V_n = V(x_n); \quad \psi_n = \psi(x_n)$$

$$\text{Grensebetingelser: } V_0 = V_{N+1} = \infty; \quad \psi_0 = \psi_{N+1} = 0$$

Diskretisering av $d^2\psi/dx^2$:

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

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

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

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

TUSL: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$ (43)

Erstattes nå av N differanseligninger:

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

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

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} \varepsilon + V_1 & -\frac{\varepsilon}{2} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{\varepsilon}{2} & \varepsilon + V_2 & -\frac{\varepsilon}{2} & 0 & & \\ 0 & -\frac{\varepsilon}{2} & \varepsilon + V_3 & -\frac{\varepsilon}{2} & & \\ \vdots & & & & & \\ & & & -\frac{\varepsilon}{2} & \varepsilon + V_{N-1} & -\frac{\varepsilon}{2} \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -\frac{\varepsilon}{2} & \varepsilon + V_N \end{bmatrix}$$

$$\vec{\Psi} = \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_{N-1} \\ \psi_N \end{bmatrix}$$

Tridiagonal, reell og symmetrisk Hamiltonmatrise $\mathbf{H}$

Har ikke-trivielle egenvektorer, dvs $\vec{\Psi} \neq 0$, når

$$\det \{\mathbf{H} - E\mathbf{I}\} = 0$$

Enhetsmatrisen:

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ 0 & & & \ddots & \\ & 0 & & & 1 \end{bmatrix}$$

Determinanten er et N.gradspolynom i E som gir 44

- N distinkte energiegenverdier $E_1, E_2, \dots, E_N$
- N tilhørende egenvektorer $\vec{\psi}^{(1)}, \vec{\psi}^{(2)}, \dots, \vec{\psi}^{(N)}$

En effektiv funksjon i "biblioteket" `scipy.linalg` er `eigh_tridiagonal`. Gjøres tilgjengelig i ditt python-program med kommandoen

```
from scipy.linalg import eig_h_tridiagonal
```

Egenverdiene er sortert:

$$E_1 < E_2 < \dots < E_N$$

Egenvektorene er reelle og ortonormerte:

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

Pass på notasjonen: $\psi_n^{(j)} = \psi^{(j)}(x_n)$

Starttilstand som sum av de N stasjonære løsn.:

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

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

Tidsutviklingen:

$$\Psi_k(t) = \sum_{j=1}^N c^{(j)} \psi_k^{(j)} e^{-iE_j t/\hbar} ; k=1, 2, \dots, N$$