ΑΣΚΗΣΗ ΙΙ

Εύρεση ιδιοτιμών με αριθμητική επίλυση της Δ.Ε.

1. Ο Αρμονικός Ταλαντωτής

Οπως είναι γνωστό, ένα κινητό που κινείται κάτω απο την επίδραση μιας δύναμης $F = -\kappa x$ στην κλασσική μηχανική εκτελεί αρμονική ταλάντωση. Το αντίστοιχο κβαντομηχανικό πρόβλημα παραπέμπει στην λύση της εξίσωσης του Schroedinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}\kappa x^2 u(x) = Eu(x)$$

όπου $u(x)$ οι κυματοσυναρτήσεις του αρμονικού ταλαντωτή και E οι ιδιοτιμές της ενέργειας. Για να λύσει κανείς την παραπάνω εξίσωση χρησιμοποιεί αδιάστατες μεταβλητές

$\alpha^4 = \dfrac{m\kappa}{\hbar^2}$, $\xi = \alpha x$, $\lambda = \dfrac{2E}{\hbar}\left(\dfrac{m}{\kappa}\right)^{1/2} = \dfrac{2E}{\hbar\omega}$, οπότε η Δ.Ε. γράφεται

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} - \xi^2 u = -\lambda u\ ,\ \lambda > 0. \tag{1.1}$$

Η παραπάνω Δ.Ε. είναι του τύπου Hermite. Οι λύσεις που έχουν φυσική σημασία (δέσμιες καταστάσεις) μηδενίζονται για $\xi \to \pm\infty$ και είναι

$$u_n(\xi) = N_n H_n(\xi)\exp(-\frac{1}{2}\xi^2)\ ,\ \lambda = 2n+1, n = 0,1,2\ldots$$

όπου $H_n(\xi)$ είναι τα πολυώνυμα Hermite και $N_n = \left(\dfrac{1}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{1/2}$ παράγων νορμαλισμού.

Ας υποθέσουμε τώρα ότι ενδιαφερόμαστε να επιλύσουμε αριθμητικά την Δ.Ε.(1.1) χρησιμοποιώντας την αριθμητική ρουτίνα **NDSolve**. Το πρώτο που θα πρέπει να μας απασχολήσει είναι το θέμα των σωστών αρχικών τιμών. Η ΔΕ. (1.1) είναι δεύτερης τάξης, άρα χρειάζεται δύο αρχικές συνθήκες π.χ. $u(0)$ και $u'(0)$ για να λυθεί. Προκειμένου να καθορίσουμε αυτές τις συνθήκες πατρατηρούμε ότι η (1.1) είναι συμμετρική κάτω απο τον μετασχηματισμό $\xi \to -\xi$ οπότε οι λύσεις θα είναι είτε άρτιες συναρτήσεις $u_s(-\xi) = u_s(\xi)$ είτε περιττές $u_a(-\xi) = -u_a(\xi)$. Η μαθηματική αυτή ιδιότητα δεν είναι τίποτε άλλο από την διατήρηση της parity στο αντίστοιχο κβαντομηχανικό πρόβλημα. Επιπλέον, η γραμμικότητα της (1.1) συνεπάγεται ότι αν έχω μία λύση $u(\xi)$ τότε και η $c_1 u(\xi)$ όπου c_1 σταθερά αποτελεί λύση.

Συνοψίζοντας λοιπόν, έχω δύο κατηγορίες λύσεων όπου οι αρχικές συνθήκες χωρίς βλάβη της γενικότητας μπορούν να γραφούν ως εξής:

- Αρτιες λύσεις με αρχ. συνθήκες $u(0) = 1$ και $u'(0) = 0$ (εξηγείστε γιατί)
- Περτττές λύσεις με αρχ. συνθήκες $u(0) = 0$ και $u'(0) = 1$ (εξηγείστε γιατί).

Τι γίνεται τώρα με την τιμή του λ; Η τιμή του λ είναι το ζητούμενο και η σωστή τιμή του θα προκύψει μόνο αν η αριθμητική λύση μηδενίζεται για $\xi \to \pm\infty$. Εδώ θυμόμαστε ότι οι Δ.Ε. όπως η (1.1) έχουν δύο λύσεις, την κανονική η οποία μηδενίζεται για $\xi \to \pm\infty$, και την μη κανονική η οποία αποκλίνει στο όριο $\xi \to \pm\infty$. Οταν ολοκληρώνουμε αριθμητικά μιά τετοια εξίσωση είναι αδύνατο να ακολουθήσουμε την κανονική λύση για πολύ μακριά γιατί, λόγω συσσώρευσης των αριθμητικών σφαλμάτων, γεννάμε την μη κανονική λύση η οποία τελικά κερδίζει μιά και μεγαλώνει πολύ γρήγορα. Στην πράξη αυτό σημαίνει ότι η αριθμητική μας λύση τελικά θα αποκλίνει. Το μόνο που μπορούμε να κάνουμε είναι να καθυστερήσουμε την απόκλιση αυτή μεταβάλλοντας την τιμή του λ. Ετσι λοιπόν, φτιάχνοντας ένα πρόγραμμα που ολοκλήρώνει την διαφορική εξίσωση γιά διάφορες τιμές του λ και σχεδιάζοντας τις λύσεις, μπορούμε να βρούμε προσεγγιστικά σωστές τιμές για τις ενεργειακές ιδιοτιμές.

Σχέδιο Προγράμματος:

1.The Harmonic Oscillator

1a. Even eigenfunctions

```
he1[m_] :=
 NDSolve[{u''[x] - x^2 u[x] == -m u[x], u[0] == 1,
    u'[0] == 0}, u, {x, 0, 5}][[1, 1, 2]]

he11[m_] := With[{y = he1[m]},
  Plot[y[x], {x, 0, 5}, PlotRange → {-2, 2}]]

he12[m_] := With[{y = he1[m]}, y[5]]
he13[m_] := Floor[Round[he12[m]]]
he14[m_] := If[he13[m] == 0, m , _]
```

1b.Odd eigenfunctions

```
ho1[m_] :=
 NDSolve[{u''[x] - x^2 u[x] == -m u[x], u[0] == 0,
    u'[0] == 1}, u, {x, 0, 6}][[1, 1, 2]]

ho11[m_] := With[{y = ho1[m]},
  Plot[y[x], {x, 0, 5}, PlotRange → {-1, 1}]]

ho12[m_] := With[{y = ho1[m]}, y[6]]
ho13[m_] := Floor[Round[ho12[m]]]
ho14[m_] := If[ho13[m] == 0, m , _]
```

Για όσες εντολές στο παραπάνω πρόγραμμα δεν καταλαβαίνετε, μπορείτε να βρείτε περισότερες πληροφορίές στο **Help** του **Mathematica**.

2. Ο Αναρμονικός ταλαντωτής

Στην περίπτωση αυτή η εξίσωση του Schroedinger είναι

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}\kappa x^2u(x)+\frac{1}{4}\mu x^4u(x)=Eu(x)\cdot$$

Εδώ διακρίνουμε τις περιπτώσεις $\kappa>0$ η και $\kappa<0$. Χρησιμοποιούμε όπως και πρίν τις αδιάστατες μεταβλητές

$$\alpha^4 = \frac{m|\kappa|}{\hbar^2}\ ,\ \xi = \alpha x\ ,\ \lambda = \frac{2E}{\hbar}\left(\frac{m}{|\kappa|}\right)^{1/2} = \frac{2E}{\hbar\omega}\ ,\ \rho = \frac{1}{2}\frac{\mu}{|\kappa|\alpha^2}$$

και η εξίσωση γίνεται

$$\frac{d^2u}{d\xi^2} - \left(\pm\xi^2 + \rho\,\xi^4\right)u = -\lambda u\ .$$

Η προηγούμενη ανάλυση ισχύει καί εδώ χωρίς αλλαγές οπότε παραλείπεται.

Σχέδιο Προγράμματος:

2.The Unharmonic Oscillator (κ>0)

2a.Even eigenfunctions

```
uhpe1[m_] :=
 NDSolve[{u''[x] - x^2 u[x] - 0.1 x^4 u[x] == -m u[x],
    u[0] == 1, u'[0] == 0}, u, {x, 0, 4}][[1, 1, 2]]

uhpe11[m_] := With[{y = uhpe1[m]},
  Plot[y[x], {x, 0, 5}, PlotRange → {-2.5, 2.5}]]

uhpe12[m_] := With[{y = uhpe1[m]}, y[4]]
uhpe13[m_] := Floor[Round[uhpe12[m]]]
uhpe14[m_] := If[uhpe13[m] == 0, m , _ ]
```

2b. Odd eigenfunctions

```
uhpo1[m_] :=
 NDSolve[{u''[x] - x^2 u[x] - 0.1 x^4 u[x] == -m u[x],
    u[0] == 0, u'[0] == 1}, u, {x, 0, 5}][[1, 1, 2]]

uhpo11[m_] := With[{y = uhpo1[m]},
  Plot[y[x], {x, 0, 5}, PlotRange → {-2.5, 2.5}]]

uhpo12[m_] := With[{y = uhpo1[m]}, y[5]]
uhpo13[m_] := Floor[Round[uhpo12[m]]]
uhpo14[m_] := If[uhpo13[m] == 0, m , _ ]
```

3.The Unharmonic Oscillator (κ<0)

3a. Even eigenfunctions

```
uhme1[m_] :=
 NDSolve[{u''[x] + x^2 u[x] - 0.1 x^4 u[x] == -m u[x],
    u[0] == 1, u'[0] == 0}, u, {x, 0, 5}][[1, 1, 2]]
```

```
uhme11[m_] := With[{y = uhme1[m]},
  Plot[y[x], {x, 0, 5}, PlotRange → {-2.5, 2.5}]]
```

```
uhme12[m_] := With[{y = uhme1[m]}, y[5]]
uhme13[m_] := Floor[Round[uhme12[m]]]
uhme14[m_] := If[uhme13[m] == 0, m , _]
```

3b. Odd eigenfunctions

```
uhmo1[m_] :=
 NDSolve[{u''[x] + x^2 u[x] - 0.1 x^4 u[x] == -m u[x],
    u[0] == 0, u'[0] == 1}, u, {x, 0, 5}][[1, 1, 2]]
```

```
uhmo11[m_] := With[{y = uhmo1[m]},
  Plot[y[x], {x, 0, 5}, PlotRange → {-2.5, 2.5}]]
```

```
uhmo12[m_] := With[{y = uhmo1[m]}, y[5]]
uhmo13[m_] := Floor[Round[uhmo12[m]]]
uhmo14[m_] := If[uhmo13[m] == 0, m , _]
```