ΜΕΛΕΤΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ ΙΔΙΟΤΙΜΩΝ

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

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

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

Εστω τώρα ότι προσπαθούμε να βρούμε έναν προσεγγιστικό τρόπο επίλυσης του παραπάνω προβλήματος χρησιμοποιώντας το Mathematica η κάτι ανάλογο. Αρχίζουμε διακριτοποιώντας το πεδίο ορισμού του $\xi \in \left[-C, C\right]$, $\xi_0 = -C$, $\xi_N = C$, $\xi_n = \xi_0 + nh, n = 1,2\ldots N-1, h = \dfrac{2C}{N}$. Ορίζω $u(\xi_n) = u_n$ και για τις παραγώγους αντικαθιστώ τους προσεγγιστικούς τύπους

$$\frac{du}{d\xi} \to \frac{u_{n+1} - u_{n-1}}{2h}, \frac{d^2u}{d\xi^2} \to \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{h^2}.$$

Η Δ.Ε. τώρα γράφεται προσεγγιστικά ως ακολούθως.

$$u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1} - f(n)u_n = -\lambda h^2 u_n \cdot$$

όπου ορίσαμε

$$f(n) = h^2\left(-C + nh\right)^2 = \left(\frac{2C}{N}\right)^4\left(n - \frac{N}{2}\right)^2 \cdot$$

Αν τώρα το C ειναι αρκετά μεγάλο (στην πράξη 5-10 αρκεί) μπορούμε να θέσουμε με πολύ καλή προσέγγιση $u_0 = u_N = 0$. Τότε η παραπάνω εξίσωση γίνεται πολύ απλά η εξίσωση ιδιοτιμών του $(n-1)\times(n-1)$ πίνακα

$$A_{n,m} = \delta_{n+1,m} - \left[2 + f(n)\right]\delta_{n,m} + \delta_{n-1,m}$$

με το διάνυσμα $\left[u_1, u_2, \cdots, u_{N-1}\right]$ να είναι το ιδιοδιάνυσμα . Στην πράξη τώρα το πρόβλημα επιλύεται πολύ εύκολα με το Mathematica δεδομένου ότι ο πινακας $\delta_{n,m}$ είναι εσωτερική συνάρτηση του προγράμματος (KroneckerDelta[n,m]) και ο πίνακας A μπορεί να παραχθεί χρησιμοποιώντας την εντολή Table. Ετσι, χρησιμοποιώντας τις εντολές Eigenvalues και Eigenvectors λύνει κανείς το πρόβλημα σχεδόν αμέσως. Οσον αφορά την τιμή του N μία τιμή 150-200 δίνει ικανοποιητική προσέγγιση. Το Mathematica εξ' ορισμού βρίσκει νορμαλισμένα ιδιοδιανύσματα για τον πίνακα A.

Οταν κανείς επιχειρήσει να συγκρίνει το ιδιοδιάνυσμα με την ακριβή κυματοσυνάρτηση βλέπει ότι δεν συμπίπτουν. Αυτό είναι λογικό γιατι η διακριτοποίηση της ακριβούς κυματοσυνάρτησης $u_m(\xi_n)$ δεν παράγει νορμαλισμένο διάνυσμα. Η σύγκριση πρέπει να γίνει με το διάνυσμα $\overline{u}_m(\xi_n) = u_m(\xi_n) \,/\, \sum_n u_m(\xi_n) u_m(\xi_n)$ οπότε προκύπτει σχεδόν τέλεια σύμπτωση.

2. Ο Αναρμονικός ταλαντωτής

Στην περίπτωση αυτή η εξίσωση του Schroedinger είναι

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

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 συνάρτηση $f(n)$ τώρα δίδεται από την σχέση

$$f(n) = \pm\left(\frac{2C}{N}\right)^4\left(n - \frac{N}{2}\right)^2 + \rho\left(\frac{2C}{N}\right)^6\left(n - \frac{N}{2}\right)^4$$

και ο πίνακας A δίδεται όπως και πριν από την σχέση

$$A_{n,m} = \delta_{n+1,m} - \left[2 + f(n)\right]\delta_{n,m} + \delta_{n-1,m}\ \cdot$$

```
del[n_, m_] := KroneckerDelta[n, m]

(* Generate the discretized potential *)

f[n_, p_] := (2 c / p) ^ 4 (n - p / 2) ^ 2

(* Generate the matrix *)

mat[p_] :=
 Table[del[n + 1, m] - (2 + f[n, p]) del[n, m] + del[n - 1, m],
  {n, 1, p - 1}, {m, 1, p - 1}]

(* Calculate the Eigenvalues *)

eigv[p_] := -Eigenvalues[mat[p]] p ^ 2 / (2 c) ^ 2

(****************************************************
 *****)

(* Sort[eigv[p] sorts the eigenvalues in natural
   order *)
(* Take[eigv[p],n] takes the first n of them *)

(****************************************************
 *****)

(* Calculate the Eigenvectors *)
(* Chop rounds off the decimal points to 4 *)
(* [[p-n]]==Part[#,p-n] chooses the right
   eigenvector, Mathematica calculates first the
  large eigenvalues *)

(****************************************************
 *****)

vector[p_, n_] :=
 Chop[Eigenvectors[mat[p]], 10 ^ (-4)][[p - n]]

(* The exact wavefunction in discretized form *)

wavfun[n_, q_, p_] :=
 Sqrt[1 / (Sqrt[Pi] 2 ^ (n - 1) (n - 1) !)]
  HermiteH[n - 1, -c + q 2 c / p] Exp[-1 / 2 (-c + q 2 c / p) ^ 2]
```