

ΑΝΩΤΑΤΟ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΚΡΗΤΗΣ
ΣΧΟΛΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΤΕ



Πτυχιακή εργασία
ΕΠΙΛΥΣΗ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΩΝ ΙΔΙΟΤΙΜΩΝ
ΤΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗΣ ΤΟΥ SCHRÖDINGER

ΙΩΑΝΝΗΣ ΠΟΝΤΙΚΗΣ
ΗΡΑΚΛΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ 2017

Σύμβουλος καθηγητής
ΓΕΩΡΓΙΟΣ ΚΑΒΟΥΛΑΚΗΣ

ΗΡΑΚΛΕΙΟ ΚΡΗΤΗΣ 2017

Πνευματικά δικαιώματα

Copyright © Ιωάννη Ποντίκη, [2017]

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Η έγκριση της πτυχιακής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών Τ.Ε. του Τεχνολογικού Εκπαιδευτικού Ιδρύματος Κρήτης δεν υποδηλώνει απαραίτητως και αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα εκ μέρους του Τμήματος.

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ

ΠΙΝΑΚΑΣ ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΩΝ	3
ΠΕΡΙΛΗΨΗ.....	5
ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	6
1 ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ – ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΙΔΙΟΤΙΜΩΝ	7
1.1 Ιστορική αναδρομή.....	7
1.2 Η εξίσωση του Schrödinger απουσία εξωτερικού δυναμικού.....	8
1.3 Η εξίσωση του Schrödinger παρουσία εξωτερικού δυναμικού.....	9
1.4 Ιδιότητες των ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων των αυτοσυζυγών τελεστών.....	10
1.5 Η γενική λύση της χρονικά-εξαρτημένης εξίσωσης του Schrödinger	11
2 ΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ ΙΔΙΟΤΙΜΩΝ.....	13
2.1 Η μέθοδος της διάδοσης σε φανταστικό χρόνο και η σχέση της με την παρούσα μέθοδο	13
2.2 Μια απλή εφαρμογή της μεθόδου	14
2.3 Αρμονικό δυναμικό	17
2.3.1 Σύγκλιση της ιδιοενέργειας συναρτήσει της διάστασης του χώρου	17
2.3.2 Σύγκλιση της ιδιοκατάστασης συναρτήσει της διάστασης του χώρου	18
2.3.3 Σύγκλιση της ιδιοενέργειας συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων	19
2.3.4 Σύγκλιση της ιδιοκατάστασης συναρτήσει των επαναλήψεων.....	21
2.4 Αναρμονικό δυναμικό	24
2.4.1 Σύγκλιση της ιδιοενέργειας συναρτήσει της διάστασης του χώρου	24
2.4.2 Σύγκλιση της ιδιοκατάστασης συναρτήσει της διάστασης του χώρου	25
2.4.3 Σύγκλιση της ιδιοενέργειας συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων	27
2.4.4 Σύγκλιση της ιδιοκατάστασης συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων	28
2.5 Ιδιοκαταστάσεις και ιδιοενέργειες για δύο διαφορετικά εξωτερικά δυναμικά	31

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	33
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	34
3 ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ.....	35
3.1 Κώδικας MATLAB.....	35

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην πτυχιακή μου εργασία ασχολήθηκα με την εξίσωση του Schrödinger και το αντίστοιχο πρόβλημα ιδιοτιμών που προκύπτει, παρουσία ενός εξωτερικού δυναμικού.

Παρότι για ορισμένα δυναμικά η λύση του εν λόγω προβλήματος μας είναι γνωστή αναλυτικά, εν γένει πρέπει να προσφύγουμε σε αριθμητικές μεθόδους. Μεταξύ αυτών είναι και η λεγόμενη μέθοδος της διάδοσης σε φανταστικό χρόνο, όπου δουλεύοντας επαναληπτικά ελπίζει κανείς να βρει μια συγκλίνουσα λύση, η οποία θα είναι και η υπό εξεύρεση ιδιοκατάσταση χαμηλότερης ενέργειας.

Η μέθοδος την οποία ανέπτυξα γενικεύει τη μέθοδο διάδοσης σε φανταστικό χρόνο και – παρότι δε συνέκρινα την ταχύτητα σύγκλισης των δύο μεθόδων – είναι καταρχήν πιο γρήγορη, δηλαδή μας δίδει τη δυνατότητα επίλυσης του προβλήματος ιδιοτιμών με ταχύτερη σύγκλιση.

Στους υπολογισμούς που παρουσιάζω έχω συμπεριλάβει το αρμονικό δυναμικό, όπου γνωρίζοντας την ακριβή λύση, επαλήθευσα την ακρίβεια της μεθόδου μου, τόσο ως προς η διάσταση του χώρου στον οποίο περιοριζόμαστε, όσο και τον αριθμό των επαναλήψεων. Κατόπιν πέρασα στο αναρμονικό δυναμικό, όπου πλέον (έκτος από οριακές περιπτώσεις, όπου μπορεί να χρησιμοποιηθεί η θεωρία διαταραχών) αναγκαστικά προσφεύγουμε σε αριθμητικές μεθόδους. Έτσι, επανέλαβα τον ίδιο υπολογισμό για το δυναμικό αυτό και υπολόγισα την ελάχιστη ιδιοενέργεια και την αντίστοιχη ιδιοκατάσταση.

Τέλος, θεώρησα και ένα άλλο δυναμικό το οποίο αυξάνεται ακόμα πιο ραγδαία συναρτήσει της απόστασης από το κέντρο και συνέκρινα τις ιδιοκαταστάσεις χαμηλότερης ενέργειας των τριών δυναμικών.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Το θέμα της παρούσας πτυχιακής εργασίας είναι η επίλυση προβλημάτων ιδιοτιμών που προκύπτουν από την εξίσωση του Schrödinger.

Όπως είναι γνωστό, σε ορισμένες, ειδικές, περιπτώσεις το εν λόγω πρόβλημα μπορεί να αντιμετωπισθεί αναλυτικά, όπως, για παράδειγμα, στην περίπτωση του αρμονικού δυναμικού, ή του δυναμικού Coulomb. Από την άλλη μεριά, εν γένει το πρόβλημα αυτό για ένα τυχόν δυναμικό επιλύεται μονάχα αριθμητικά.

Στην εργασία μου έχω αναπτύξει μια πρωτότυπη αριθμητική μέθοδο, η οποία επιτρέπει την εξεύρεση της λύσης με την ελάχιστη ιδιοτιμή για ένα τυχόν δυναμικό. Το πρόβλημα αυτό έχει εξετασθεί ευρύτατα στο παρελθόν και υπάρχουν πολλές και διάφορες μέθοδοι επίλυσής του. Μια από αυτές τις μεθόδους είναι και η «λεγόμενη διάδοση σε φανταστικό χρόνο», η οποία είναι μια επαναληπτική μέθοδος. Όπως εξηγώ πιο κάτω, ο κώδικας τον οποίο έχω αναπτύξει στην εργασία μου αποτελεί ουσιαστικά μια βελτιωμένη έκδοση αυτής της μεθόδου.

Τόσο σε αυτήν, όσο και σε κάθε παρόμοια επαναληπτική μέθοδο, το ζητούμενο είναι να βρεθούν συγκλίνουσες λύσεις. Ένα βασικό ερώτημα είναι η τιμή που θα δώσει κανείς στο «βήμα» της κάθε επανάληψης. Προφανώς μικρά βήματα απαιτούν μεγάλο αριθμό επαναλήψεων, οι οποίες κάνουν τη μέθοδο αργή. Από την άλλη μεριά, μεγάλα βήματα οδηγούν ενδεχομένως την υπό εξεύρεση λύση μακριά από την επιθυμητή (στην φιλοσοφία του αναπτύγματος Taylor, όπου αναπτύσσει κανείς μια συνάρτηση γύρω από ένα σημείο). Όπως είναι γνωστό εμπειρικά, η καλύτερη επιλογή είναι μια ενδιάμεση τιμή του βήματος, η οποία είναι ούτε πολύ μικρή, αλλά ούτε και πολύ μεγάλη.

Το πλεονέκτημα της μεθόδου που έχω αναπτύξει είναι το ότι (ουσιαστικά κρατώντας περισσότερους όρους στο αντίστοιχο ανάπτυγμα Taylor) μπορεί να επιλεγεί ένα μεγαλύτερο βήμα στην κάθε επανάληψη και ως εκ τούτου να επιτευχθεί ταχύτερη σύγκλιση.

1 ΚΒΑΝΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ – ΤΟ ΠΡΟΒΛΗΜΑ ΙΔΙΟΤΙΜΩΝ

1.1 Ιστορική αναδρομή

Στα τέλη του 19ου αιώνα ήταν κοινή η πεποίθηση ότι τα μεγάλα προβλήματα είχαν κλείσει.

Ωστόσο, η τεχνολογική ανάπτυξη που σημειώθηκε εκείνη την εποχή οδήγησε σε ορισμένα πειράματα, τα οποία ανάγκασαν τους επιστήμονες να αναθεωρήσουν εντελώς τις απόψεις τους.

Τα σημαντικότερα πειράματα ήταν: το φάσμα μέλανος σώματος, το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο και η σταθερότητα των ατόμων. Σχετικά με το τελευταίο, είχε ήδη ανακαλυφθεί το ηλεκτρόνιο και ήταν γνωστή η δομή του ατόμου: βάσει του λεγόμενου «πλανητικού» μοντέλου, τα ηλεκτρόνια περιστρέφονταν γύρω από τους πυρήνες. Ωστόσο, μια προφανής αντίφαση στην εικόνα αυτή ήταν το γεγονός ότι το ηλεκτρόνιο – όντας φορτισμένο – καθώς επιταχύνονταν λόγω της κυκλικής/ελλειπτικής του κίνησης (γύρω από τον πυρήνα) όφειλε να χάνει ενέργεια και να πέσει στον πυρήνα, πράγμα το οποίο προφανώς δε συμβαίνει. Έτσι, το εύλογο ερώτημα ήταν η εξήγηση αυτού του μυστηρίου.

Οι παραπάνω παρατηρήσεις οδήγησαν στη διατύπωση της «κβαντικής θεωρίας», η οποία έγινε σε δύο φάσεις, στην «παλαιά» κβαντική θεωρία και στη «νέα». Σε μια από τις καίριες και επαναστατικές αλλαγές που επέφερε η νέα κβαντική θεωρία ήταν η ακόλουθη: Ήδη γνωρίζαμε ότι το φως και γενικότερα η Η/Μ ακτινοβολία είχε και σωματιδιακές, αλλά και κυματικές ιδιότητες. Στη νέα κβαντική θεωρία το ίδιο συνέβαινε και με την ύλη.

Στην κλασική φυσική για να προσδιορίσουμε την κατάσταση ενός σώματος χρησιμοποιούμε τη θέση και την ταχύτητά του. Στον μικρόκοσμο, όπου είναι απαραίτητη η κβαντική περιγραφή, η κατάσταση ενός σωματιδίου προσδιορίζεται μέσω της «κυματοσυνάρτησής» του, Ψ , η οποία φέρει όλη την πληροφορία για το σωματίδιο. Αυτή η συνάρτηση περιγράφει ένα κύμα πιθανότητας, υπό την έννοια ότι το τετράγωνο της νόρμας του Ψ , $|\Psi(x)|^2$, δίδει την πιθανότητα να βρεθεί το σωματίδιο στο διάστημα μεταξύ x και $x+\delta x$. Η δε κυματοσυνάρτηση Ψ ικανοποιεί την εξίσωση του Schrödinger, την οποία μελετώ στην παρούσα εργασία.

Παρότι δε σχετίζονται με την εργασία μου, ενδιαφέρον είναι να παραθέσει κανείς και ορισμένα ιστορικά στοιχεία. Πριν ο Schrödinger βρει την εξίσωσή του, ήδη (λίγους μήνες

πριν) ο Heisenberg το 1925 είχε ανακαλύψει την μηχανική των μητρών. Ο Heisenberg διατύπωσε, λοιπόν, με βάση τα παρατηρούμενα μεγέθη και με τη βοήθεια των μητρών, το στρυφνό και έντονα μαθηματικοποιημένο πρώτο μοντέλο της κβαντικής μηχανικής.

Ο Schrödinger όμως δεν ικανοποιούνταν από αυτό το μοντέλο επειδή αφ' ενός δεν του άρεσαν τα περίπλοκα τεχνάσματα της θεωρίας αυτής και αφ' ετέρου επειδή αδυνατούσε να αποκτήσει οποιαδήποτε αίσθηση για αυτήν. Έτσι, ακολούθησε το δικό του, ανεξάρτητο, δρόμο, περιγράφοντας μαθηματικά το άτομο με τον ίδιο τρόπο που περιγράφουμε ένα σύστημα που ταλαντώνεται, και εισάγοντας αξιωματικά την ισοδυναμία όλων των δυνατών φυσικών ταλαντώσεων (ιδιο-ταλαντώσεων) αυτού του συστήματος με τις ευσταθείς ενεργειακές καταστάσεις του ατόμου.

Με την βοήθεια της υπόθεσης του De Broglie ότι τα υλικά σωματίδια με ορμή και ενέργεια συμπεριφέρονταν σαν κύματα με ορισμένο μήκος κύματος, ο Schrödinger προχώρησε στην δική του κβαντική εξίσωση για το άτομο του υδρογόνου.

1.2 Η εξίσωση του Schrödinger απουσία εξωτερικού δυναμικού

Ένα ελεύθερο σωματίδιο έχει μόνο κινητική ενέργεια και συνεπώς η Χαμιλτονιανή του είναι

$$H = \frac{p^2}{2m}.$$

Στην κβαντομηχανική η ορμή γίνεται τελεστής,

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

οπότε και η Χαμιλτονιανή γίνεται επίσης τελεστής,

$$H = \frac{p^2}{2m} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}.$$

Η χρονικά-ανεξάρτητη εξίσωση του Schrödinger έχει τη μορφή

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = E \Psi,$$

όπου E είναι η ιδιοενέργεια. Παρατηρούμε ότι η εξίσωση του Schrödinger είναι μια γραμμική διαφορική εξίσωση δεύτερης τάξης, με μιγαδικές, εν γένει, λύσεις. Η αντίστοιχη χρονικά-εξαρτημένη εξίσωση του Schrödinger έχει τη μορφή

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t},$$

ή γενικότερα

$$H\Psi = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

και είναι πρώτης τάξεως ως προς τον χρόνο.

Σημαντικό είναι να αναφερθεί στο σημείο αυτό ότι η Χαμιλτονιανή είναι αυτοσυζυγής τελεστής, μια και είναι το τετράγωνο ενός αυτοσυζυγούς τελεστή, δηλαδή της ορμής. Συνεπώς, οι ιδιοτιμές του, E , είναι υποχρεωτικά πραγματικές, όπως πρέπει να συμβαίνει, καθότι αυτές δίδουν τις πιθανές ενέργειες του σωματιδίου. Περισσότερα για την βασική αυτή ιδιότητα ακολουθούν πιο κάτω.

1.3 Η εξίσωση του Schrödinger παρουσία εξωτερικού δυναμικού

Στην περίπτωση ενός σωματιδίου το οποίο κινείται υπό την επίδραση μιας δύναμης που απορρέει από μια συνάρτηση δυναμικού $V(x)$ η Χαμιλτονιανή προκύπτει από το άθροισμα της κινητικής και της δυναμικής του ενέργειας. Συνεπώς, ο αντίστοιχος Χαμιλτονιανός τελεστής θα είναι

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x).$$

Για να είναι αυτοσυζυγής ο τελεστής της Χαμιλτονιανής είναι απαραίτητο η συνάρτηση δυναμικού να είναι πραγματική.

Η προφανής γενίκευση της εξίσωσης Schrödinger είναι

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi = E \Psi$$

και

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V(x)\Psi = i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}.$$

1.4 Ιδιότητες των ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων των αυτοσυζυγών τελεστών

Πριν προχωρήσω στην περιγραφή της μεθόδου που έχω αναπτύξει, είναι σημαντικό να αναφέρω ορισμένες ιδιότητες για τους αυτοσυζυγείς τελεστές, όπως είναι η ορμή και η Χαμιλτονιανή. Οι αυτοσυζυγείς τελεστές έχουν κάποιες ιδιαίτερες ιδιότητες που τους καθιστούν κατάλληλους για την περιγραφή φυσικών ποσοτήτων. Αντίστροφα, κάθε φυσική ποσότητα, όπως η ορμή, η θέση, η ενέργεια κ.λπ., θα πρέπει αναγκαστικά να αντιστοιχεί σε αυτοσυζυγή τελεστή. Οι ιδιότητες αυτές είναι οι εξής:

I) Οι ιδιοτιμές των αυτοσυζυγών τελεστών είναι πραγματικές.

II) Οι ιδιοσυναρτήσεις των αυτοσυζυγών τελεστών είναι ορθογώνιες.

Για να αποδείξουμε αυτές τις ιδιότητες ας θεωρήσουμε την εξίσωση ιδιοτιμών ενός γενικού αυτοσυζυγούς τελεστή

$$A\psi_\alpha(x) = a\psi_\alpha(x), \quad A = A^\dagger,$$

όπου A^\dagger είναι ο συζυγής του τελεστή A .

Πολλαπλασιάζοντας με $\psi_{\alpha'}^*(x)$ και ολοκληρώνοντας, παίρνουμε

$$\int dx \psi_{\alpha'}^*(x) A \psi_\alpha(x) = a \int dx \psi_{\alpha'}^*(x) \psi_\alpha(x).$$

Από τον ορισμό του αυτοσυζυγούς τελεστή το αριστερό μέλος ισούται με

$$\begin{aligned} \left(\int dx \psi_\alpha^* A^\dagger \psi_{\alpha'} \right)^* &= \left(\int dx \psi_\alpha^* A \psi_{\alpha'} \right)^* \\ &= \left(\int dx \psi_\alpha^* a' \psi_{\alpha'} \right)^* = (a')^* \int dx \psi_{\alpha'}^*(x) \psi_\alpha(x). \end{aligned}$$

Συνεπώς,

$$(a')^* \int dx \psi_{\alpha'}^*(x) \psi_\alpha(x) = a \int dx \psi_{\alpha'}^*(x) \psi_\alpha(x),$$

ή

$$((a')^* - a) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{\alpha'}^*(x) \psi_\alpha(x) = 0.$$

Ας εφαρμόσουμε αυτή την σχέση στην περίπτωση $a' = a$. Τότε,

$$(a^* - a) \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_a(x)|^2 = 0.$$

Δεδομένου ότι ο δεύτερος παράγοντας είναι πάντοτε θετικός (εκτός από την τετριμμένη περίπτωση μηδενικής (κυματοσυνάρτησης), συμπεραίνουμε ότι οι ιδιοτιμές είναι πραγματικές, $a^* = a$.

Παίρνοντας ως δεδομένο ότι οι ιδιοτιμές είναι πραγματικές ας γράψουμε την σχέση που βρήκαμε για $a' \neq a$. Τότε έχουμε

$$(a' - a) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{a'}^*(x) \psi_a(x) = 0.$$

Δεδομένου ότι ο πρώτος παράγον είναι εξ υποθέσεως μη-μηδενικός, αναγκαστικά θα έχουμε ότι για $a' \neq a$ ισχύει

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{a'}^*(x) \psi_a(x) = 0.$$

Η ιδιότητα αυτή ονομάζεται «ορθογωνιότητα» των ιδιοσυναρτήσεων.

Εάν οι ιδιοσυναρτήσεις είναι και κανονικοποιημένες, δηλαδή, εάν επιβάλουμε τη συνθήκη $\int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi_a|^2 = 1$, τότε οι ιδιοσυναρτήσεις θα είναι ορθοκανονικές,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_a^*(x) \psi_{a'}(x) = \delta_{aa'}.$$

1.5 Η γενική λύση της χρονικά-εξαρτημένης εξίσωσης του Schrödinger

Ας θεωρήσουμε την επαλληλία

$$\Psi(x, t) = \sum_E C_E \Psi_E(x, t) = \sum_E C_E \Psi_E(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t},$$

όπου

$$H \Psi_E(x) = E \Psi_E(x)$$

είναι η εξίσωση ιδιοτιμών της ενέργειας και C_E άγνωστοι συντελεστές. Αντικαθιστώντας αυτή την επαλληλία ως μια δοκιμαστική λύση στην εξίσωση του Schrödinger, παίρνουμε

$$H \left(\sum_E C_E \Psi_E(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \right) = i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\sum_E C_E \Psi_E(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \right)$$

και

$$\sum_E C_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} H \Psi_E(x) - i\hbar \sum_E C_E \Psi_E(x) \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \right) = 0,$$

ή

$$\sum_E C_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} H \Psi_E(x) (E - E) = 0.$$

Συνεπώς, η επαλληλία αυτή είναι πάντοτε λύση της εξίσωσης Schrödinger. Οι συντελεστές C_E προσδιορίζονται συναρτήσει της αρχικής κυματοσυνάρτησης ως εξής:

Πολλαπλασιάζοντας την επαλληλία $\Psi(x, t)$ με μία ιδιοσυνάρτηση $\Psi_{E'}^*(x)$ και ολοκληρώνοντας, έχουμε

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_{E'}^*(x) \Psi(x, t) = \sum_E C_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_{E'}^*(x) \Psi_E(x).$$

Δεδομένου ότι η Χαμιλτονιανή είναι αυτοσυζυγής τελεστής, οι ιδιοσυναρτήσεις του θα είναι ορθοκανονικές. Επομένως, η παραπάνω σχέση γίνεται

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_{E'}^*(x) \Psi(x, t) = \sum_E C_E e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \delta_{EE'} = C_{E'} e^{-\frac{i}{\hbar}E't}.$$

Εφαρμόζοντας την τελευταία σχέση για την χρονική στιγμή $t = 0$, παίρνουμε

$$C_{E'} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_{E'}^*(x) \Psi(x, 0).$$

Η σχέση αυτή δίνει κάθε συντελεστή C_E συναρτήσει της αρχικής κυματοσυνάρτησης. Επομένως, η επίλυση της εξίσωσης Schrödinger για οποιοδήποτε σύστημα (και ισοδύναμα, ο καθορισμός της χρονικής εξέλιξης του συστήματος) συνίσταται σε δύο βήματα:

- 1) Την επίλυση της εξίσωσης ιδιοτιμών

$$H \Psi_E(x) = E \Psi_E(x),$$

ή

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right\} \Psi_E(x) = E \Psi_E(x).$$

- 2) Την επιβολή της αρχικής συνθήκης $\Psi(x, 0)$ που καθορίζει όλους τους συντελεστές του αναπτύγματος

$$C_E = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_E^*(x) \Psi(x, 0).$$

2 ΛΥΣΗ ΤΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ ΙΔΙΟΤΙΜΩΝ

2.1 Η μέθοδος της διάδοσης σε φανταστικό χρόνο και η σχέση της με την παρούσα μέθοδο

Είδαμε πιο πάνω ότι

$$\Psi(x, t) = \sum_E C_E \Psi_E(x, t) = \sum_E C_E \Psi_E(x) e^{\frac{-i}{\hbar} E t}.$$

Εάν κάνει κάποιος την αντικατάσταση $t \rightarrow -it$, τότε

$$\Psi(x, -it) = \sum_E C_E \Psi_E(x, -it) = \sum_E C_E \Psi_E(x) e^{\frac{-1}{\hbar} E t}.$$

Παρατηρούμε, λοιπόν, ότι εάν ξεκινήσουμε με μια τυχούσα και λογική αρχική συνάρτηση $\Psi(x, 0)$, για μεγάλους χρόνους η μόνη συνιστώσα που θα επιβιώσει στο ανάπτυγμα είναι εκείνη με τη μικρότερη ιδιοτιμή. Αυτή είναι εν συντομία η «μέθοδος της διάδοσης σε φανταστικό χρόνο».

Μια παραλλαγή της παραπάνω μεθόδου έχει ως εξής:

1. Επιλογή μιας αρχικής (κανονικοποιημένης) δοκιμαστικής κυματοσυνάρτησης Ψ_0 . Γνωρίζοντας την Χαμιλτονιανή H , μπορεί κανείς να υπολογίσει τη συνάρτηση $\Phi_1 = H \Psi_0$.
2. Δημιουργία της (κανονικοποιημένης) κατάστασης $\Psi_1 \sim \Phi_1 - \Psi_0 \langle \Psi_0 | \Phi_1 \rangle$.
3. Κατασκευή του 2×2 Χαμιλτονιανού πίνακα στη βάση των Ψ_0 και Ψ_1 και διαγωνοποίησή του. Η χαμηλότερη ιδιοτιμή είναι η νέα προσέγγιση της χαμηλότερης τιμής ενέργειας και η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση είναι η νέα μορφή του Ψ_0 .
4. Επιστροφή στο βήμα 1 και επανάληψη της διαδικασίας μέχρι να επιτευχθεί η σύγκλιση. Στη μέθοδο της διάδοσης σε φανταστικό χρόνο ισχύει ότι $H \Psi_0 \sim d\Psi_0/dt$. Σαφώς, η $d\Psi_0/dt$ περιέχει ένα κομμάτι που είναι ανάλογο του Ψ_0 και άλλο ένα που είναι ορθογώνιο στο Ψ_0 . Η συνιστώσα που είναι ορθογώνια στην Ψ_0 είναι εκείνη που αλλάζει (ουσιαστικά) την κυματοσυνάρτηση και είναι εκείνη που έχει σημασία.

Ο σκοπός της εργασίας μου είναι να βρεθεί ένας ισοδύναμος αλγόριθμος, ο οποίος θα γενικεύεται εύκολα. Ο υπολογισμός που έχω κάνει είναι μεταβολικός και χρησιμοποιεί ένα σύνολο καταστάσεων Φ_i , οι οποίες δεν είναι ούτε κανονικοποιημένες, ούτε ορθογώνιες. Αντίθετα, χαρακτηρίζεται από ένα πίνακα N , με στοιχεία μήτρας

$$N_{ij} = \langle \Phi_i | \Phi_j \rangle \text{ και } H_{ij} = \langle \Phi_i | H | \Phi_j \rangle. \quad (1)$$

Αναπτύσσοντας την υπό εξεύρεση λύση Ψ στη βάση των Φ_i ,

$$\Psi = \sum_i c_i \Phi_i \quad (2)$$

και απαιτώντας ελαχιστοποίηση της ενέργειας,

$$\frac{\partial}{\partial c_i} \left(\frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \right) = 0, \quad (3)$$

οδηγούμαστε στις εξισώσεις:

$$\sum_j H_{ij} c_j = E \sum_j N_{ij} c_j \text{ ή } \sum_j (N^{-1} H)_{ij} c_j = E c_j. \quad (4)$$

Η εξίσωση (4) μας επιτρέπει να αναπτύξουμε τον παρακάτω αλγόριθμο:

1. Επιλογή μιας αρχικής κυματοσυνάρτησης, Ψ_0 και μιας δεύτερης συνάρτησης, $\Phi_1 = H\Psi_0$.
2. Κατασκευή ενός 2×2 Χαμιλτονιανού πίνακα στη βάση των μη-ορθογώνιων καταστάσεων Ψ_0 και Φ_1 , σύμφωνα με την εξίσωση (4) και διαγωνοποίησή του.
3. Επιστροφή στο βήμα 1 και επανάληψη της διαδικασίας μέχρι να επιτευχθεί η σύγκλιση.

Ένας προφανής, βελτιωμένος, αλγόριθμος είναι ο ακόλουθος:

1. Επιλογή μιας αρχικής κυματοσυνάρτησης, Ψ_0 και $M - 1$ πρόσθετων συναρτήσεων, $\Phi_i = H^i \Psi_0$, όπου $0 \leq i \leq M - 1$.
2. Κατασκευή ενός $M \times M$ Χαμιλτονιανού πίνακα στη βάση των μη-ορθογώνιων καταστάσεων Φ_i , σύμφωνα με την εξίσωση (4) και διαγωνοποίησή του.
3. Επιστροφή στο βήμα 1 και επανάληψη της διαδικασίας μέχρι να επιτευχθεί η σύγκλιση.

2.2 Μια απλή εφαρμογή της μεθόδου

Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε το πρόβλημα του αρμονικού ταλαντωτή, $V = m\omega^2 x^2 / 2$,

όπου, θέτοντας $\hbar = m = \omega = 1$,

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2.$$

Είναι γνωστό ότι η ιδιοσυνάρτηση χαμηλότερης ενέργειας είναι η $Ce^{-x^2/2}$, όπου C είναι η σταθερά κανονικοποίησης και η ιδιοενέργεια είναι $1/2$. Πράγματι, μπορούμε να επαληθεύσουμε ότι η

$$\Psi_0 = C e^{-x^2/2}$$

είναι ιδιοκατάσταση:

$$\Psi'_0 = -C x e^{-x^2/2},$$

$$\Psi''_0 = C (-e^{-x^2/2} + x^2 e^{-x^2/2}) = -\Psi_0 + x^2 \Psi_0$$

και συνεπώς

$$-\frac{1}{2}\Psi''_0 + \frac{1}{2}x^2\Psi_0 = \frac{1}{2}\Psi_0 - \frac{1}{2}x^2\Psi_0 + \frac{1}{2}x^2\Psi_0 = E\Psi_0,$$

άρα

$$\frac{1}{2}\Psi_0 = E\Psi_0 \rightarrow E = \frac{1}{2}.$$

Περνώντας στη μέθοδο που έχω αναπτύξει, ξεκινάω με μία τυχαία, αλλά λογική συνάρτηση,

$$\Psi_0 = C e^{-x^2/4},$$

όπου C είναι και πάλι η σταθερά κανονικοποίησης. Η μέση τιμή της ενέργειας σε αυτήν την κυματοσυνάρτηση είναι $5/8 = 1/2 + 1/8$. Ξεκινώντας από την $\Psi_0 = C e^{-x^2/4}$ κατασκευάζω την κατάσταση Ψ_1 ,

$$\Psi_1 = H\Psi_0 = \left(-\frac{1}{2}\Psi''_0 + \frac{1}{2}x^2\Psi_0\right),$$

ή

$$\Psi_1 = C e^{-x^2/4} \left(1 + \frac{3}{2}x^2\right).$$

Συνεπώς, από τις Ψ_0 και Ψ_1 υπολογίζω τα

$$N_{01} = N_{10} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0 \Psi_1 dx,$$

$$N_{00} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0^2 dx.$$

Επίσης,

$$N_{11} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1 \Psi_1 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^2 dx.$$

Από τα παραπάνω βρίσκω τον πίνακα N ,

$$N = \begin{pmatrix} N_{00} & N_{01} \\ N_{10} & N_{11} \end{pmatrix}.$$

Περνώντας στον πίνακα H ,

$$H_{00} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0 H \Psi_0 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_0 \Psi_1 dx = N_{01},$$

$$H_{10} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1 H \Psi_0 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1^2 dx = H_{01} = N_{11},$$

$$H_{11} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_1 H \Psi_1 dx.$$

Η τελική μορφή του πίνακα H είναι,

$$H = \begin{pmatrix} H_{00} & H_{01} \\ H_{10} & H_{11} \end{pmatrix}.$$

Από τους πίνακες N και H μπορώ τώρα να υπολογίσω τον πίνακα $N^{-1}H$ και να τον διαγωνιοποιήσω, βρίσκοντας ότι τα δυο ιδιοδιανύσματα (κατακόρυφες στήλες) είναι

$$\begin{pmatrix} -0.955339 & 0.459360 \\ 0.295510 & -0.888249 \end{pmatrix}$$

και οι αντίστοιχες ιδιοτιμές είναι

$$D = \begin{pmatrix} 0.5171524 & 0 \\ 0 & 3.232847 \end{pmatrix}.$$

Προφανώς η ιδιοτιμή που κρατά κανείς είναι η χαμηλότερη, 0.5171524. Συγκρίνοντας την τιμή αυτή με το $5/8 = 0.625$ διαπιστώνουμε ότι ήδη έχουμε βρει μια καλύτερη προσέγγιση. Τέλος, η αντίστοιχη ιδιοσυνάρτηση είναι:

$$\Psi = e^{-x^2/4} (A + B x^2),$$

η οποία είναι επίσης μια «βελτιωμένη» προσέγγιση. Χρησιμοποιώντας αυτήν την συνάρτηση μπορούμε να βελτιώσουμε περαιτέρω τη λύση επαναληπτικά (δουλεύοντας στον χώρο 2×2), ή να εργασθούμε σε χώρο μεγαλύτερης διάστασης, ή να συνδυάσουμε και τα δύο.

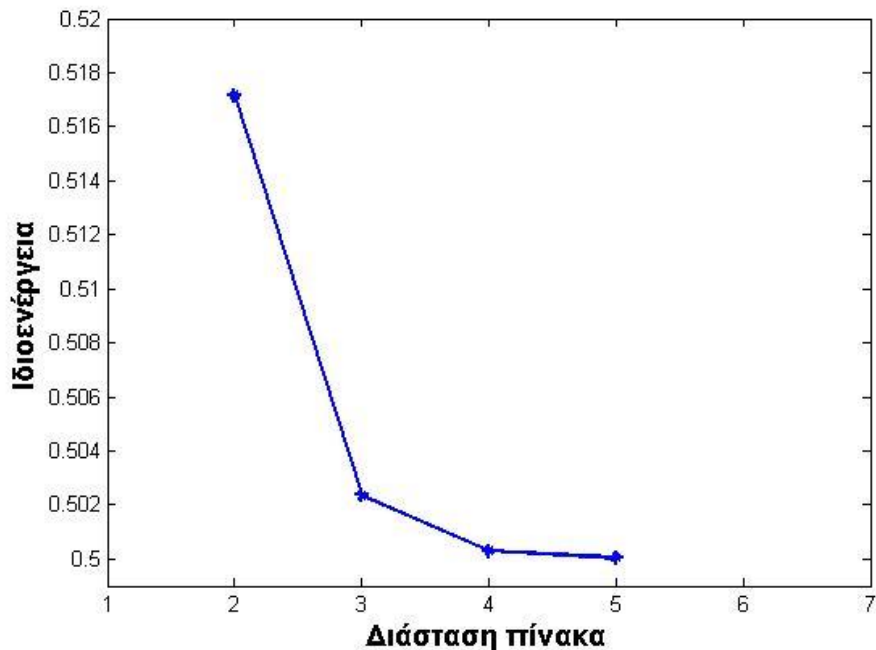
2.3 Αρμονικό δυναμικό

Ας δούμε τώρα μια πιο ακριβή εφαρμογή της μεθόδου, ξεκινούμε με το αρμονικό δυναμικό,

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2.$$

Για την επίλυση του προβλήματος χρησιμοποίησα το MATLAB. Η αρχική συνάρτηση που επέλεξα ήταν η $\Psi_0 = e^{-x^2/4}/\sqrt{2\pi}$. Οι ιδιοτιμές φαίνονται στο Γραφ. 1 και στον Πιν. 1, ενώ οι ιδιοσυναρτήσεις ακολουθούν πιο κάτω. Όπως βλέπουμε, υπάρχει μια ταχεία σύγκλιση της ιδιοενέργειας καθώς αυξάνεται η διάσταση του χώρου. Τονίζω ότι προς το παρόν δεν έχει εφαρμοσθεί η επαναληπτική διαδικασία.

2.3.1 Σύγκλιση της ιδιοενέργειας συναρτήσει της διάστασης του χώρου



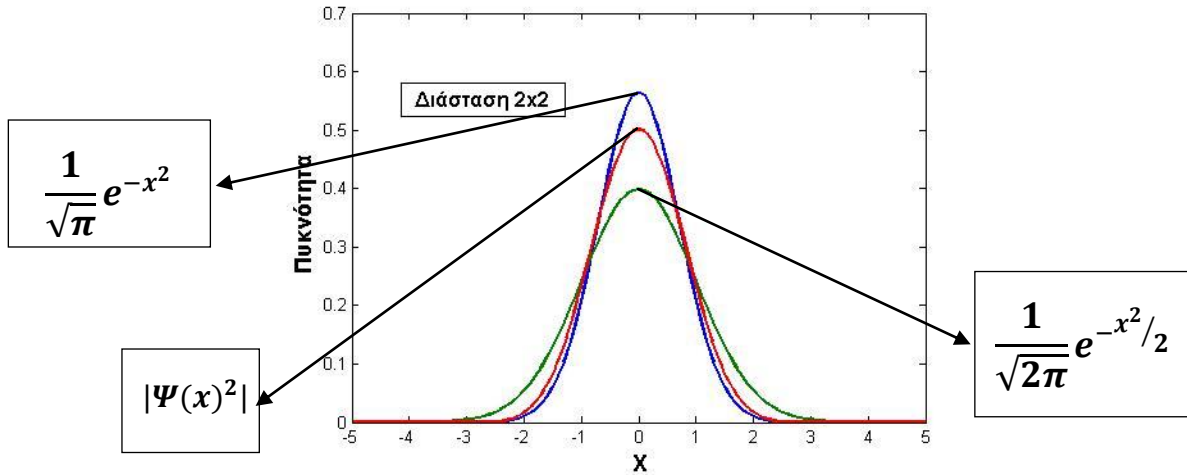
Γράφημα 1: Ιδιοενέργειες συναρτήσει της διάστασης, για πίνακες διάστασης 2x2, 3x3, 4x4 και 5x5.

2x2	0.517152438599986
3x3	0.502356081464744
4x4	0.500307512079758
5x5	0.500038648963119

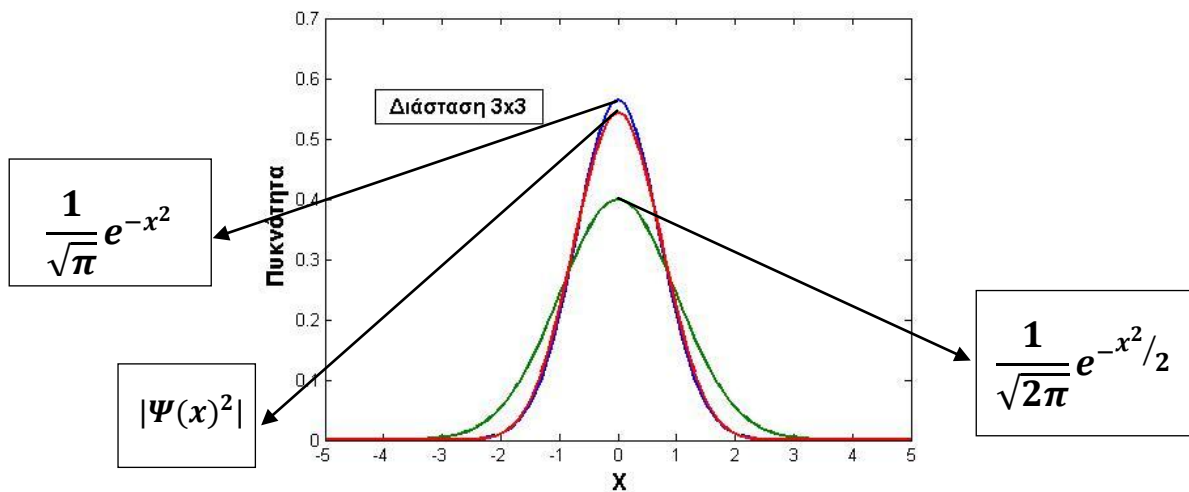
Πίνακας 1: Αριθμητικά δεδομένα για τις ιδιοτιμές.

2.3.2 Σύγκλιση της ιδιοκατάστασης συναρτήσει της διάστασης του χώρου

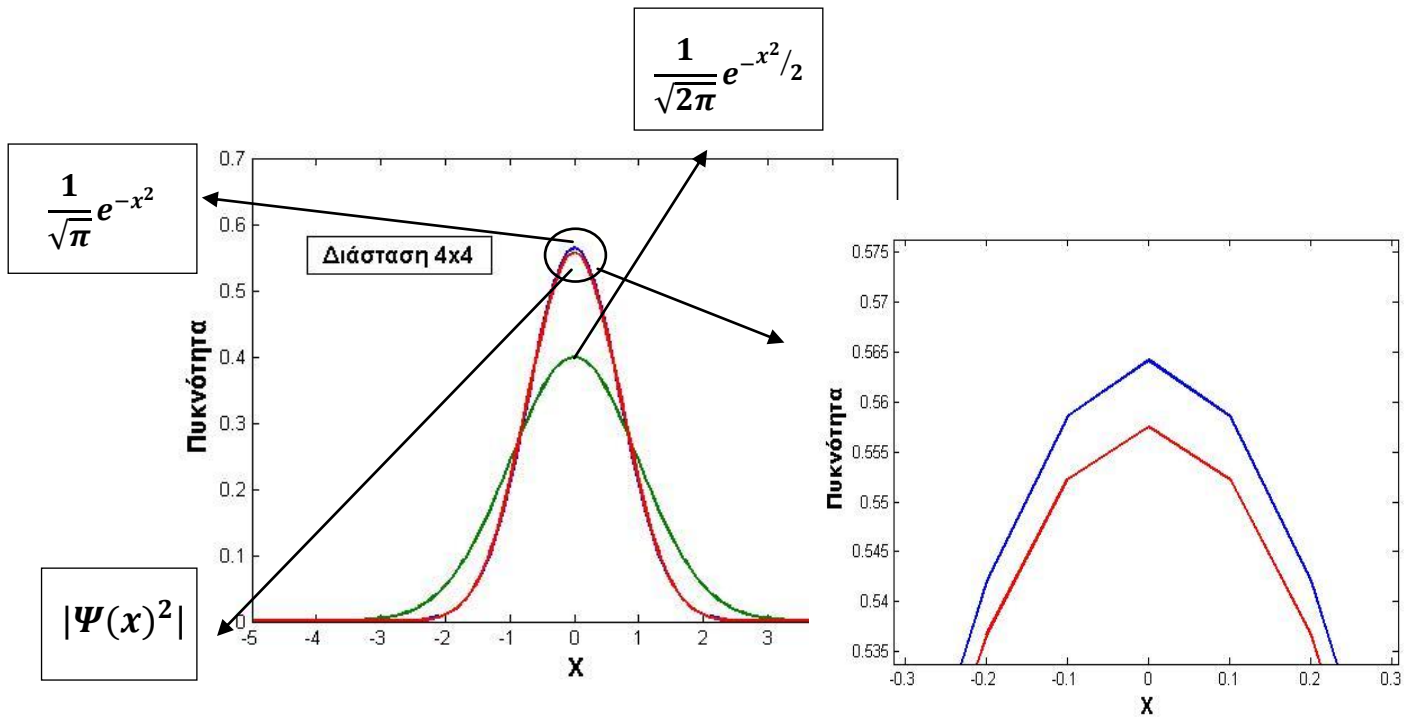
Η πυκνότητα που προκύπτει από τις αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις φαίνονται στα πιο κάτω γραφήματα. Η προφανής συνοριακή συνθήκη για όλες τις αποδεκτές λύσεις είναι ότι η κυματοσυνάρτηση είναι τετραγωνικά ολοκληρώσιμη και ως εκ τούτου μηδενίζεται για $x \rightarrow \pm\infty$.



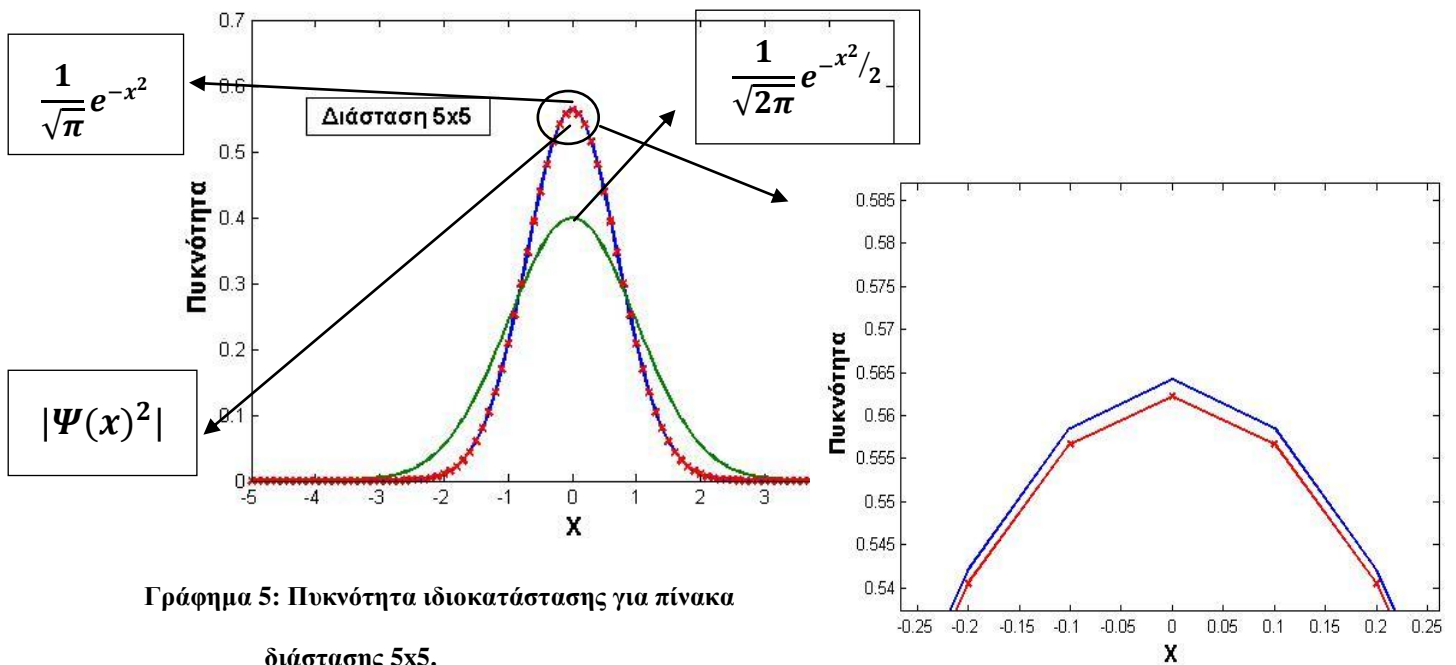
Γράφημα 2: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 2x2.



Γράφημα 3: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 3x3.



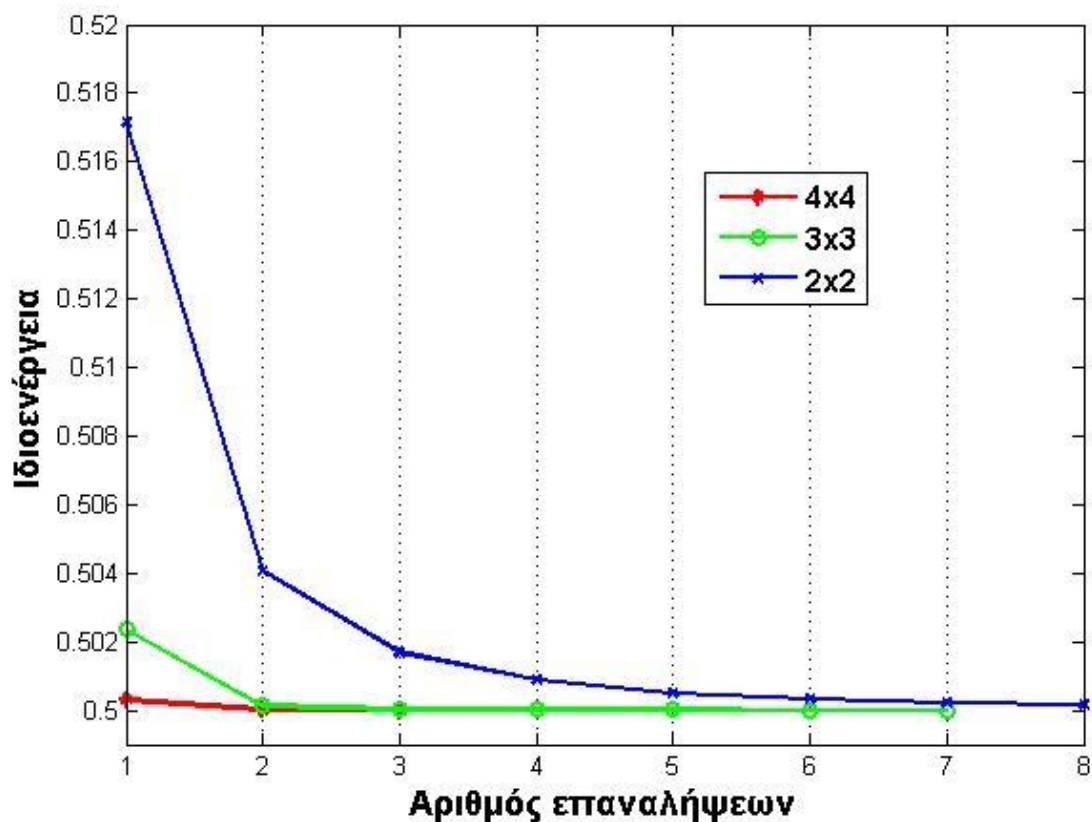
Γράφημα 4: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 4x4.



Γράφημα 5: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 5x5.

2.3.3 Σύγκλιση της ιδιοενέργειας συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων

Εφαρμόζοντας την επαναληπτική διαδικασία που περιγράψαμε νωρίτερα, μπορούμε να βελτιώσουμε την ακρίβεια της λύσης, όπως δείχνω πιο κάτω. Από τα δεδομένα που προκύπτουν φαίνεται ότι όσο μεγαλώνει το μέγεθος του πίνακα, τόσο λιγότερες επαναλήψεις απαιτούνται για να πάρουμε τη ζητούμενη σύγκλιση.



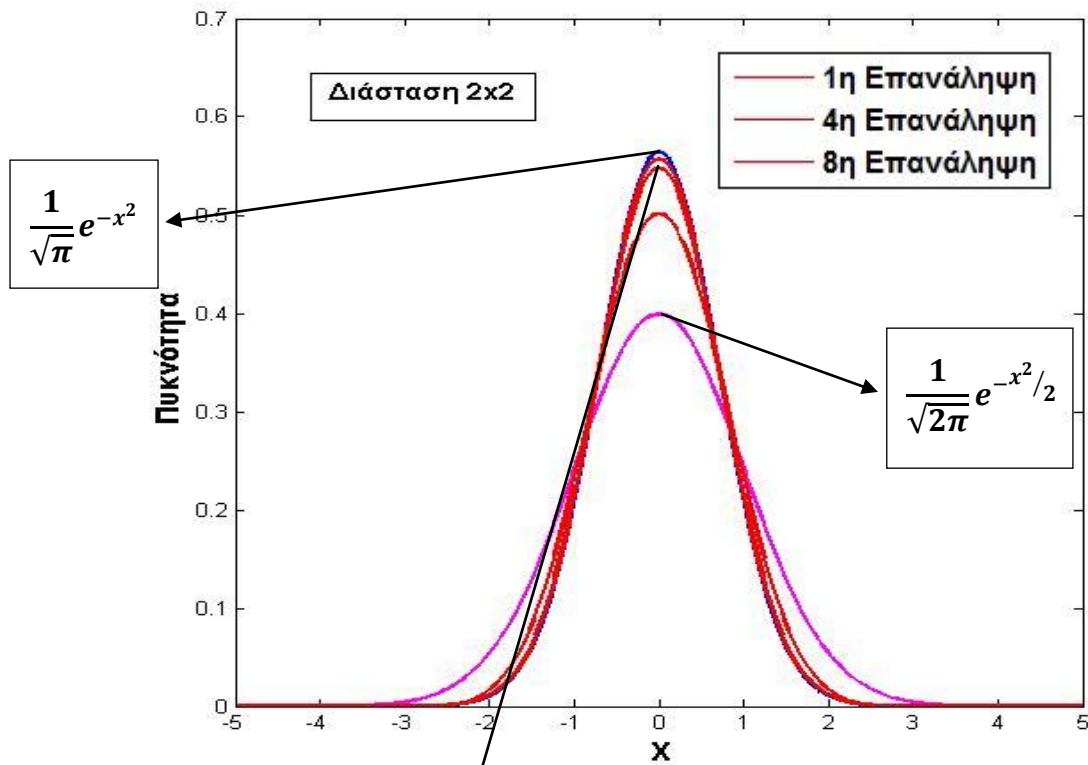
Γράφημα 6: Ιδιοενέργειες συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων, για πίνακες διάστασης 2x2, 3x3, 4x4 και 5x5.

Αρ. επαναλήψεων	2x2	3x3	4x4
1	0.517152438599986	0.502356081464744	0.500307512079758
2	0.504065926415805	0.500136603480744	0.500004332549792
3	0.501690422715077	0.500028292755696	0.500000468570770
4	0.500867820314927	0.500008326013447	-
5	0.500503442395145	0.500002977273670	-
6	0.500317034175850	0.500001281723078	-
7	0.500212009859833	0.500000606502518	-
8	0.500148441526012	-	-

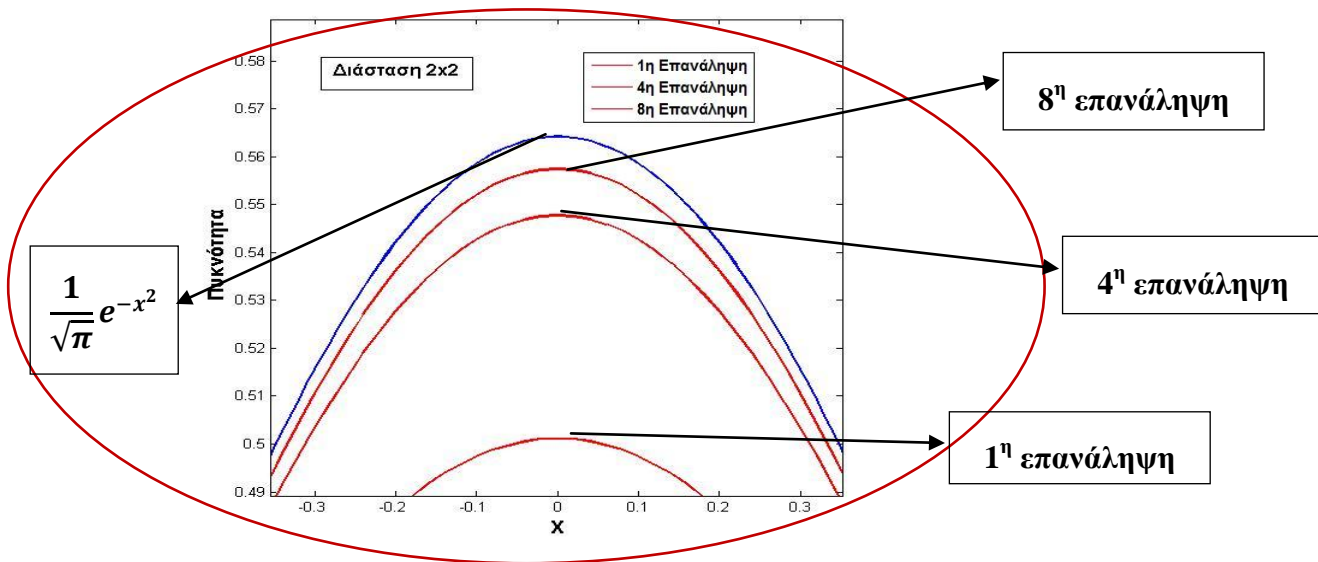
Πίνακας 2: Αριθμητικά δεδομένα για τις ιδιοτιμές.

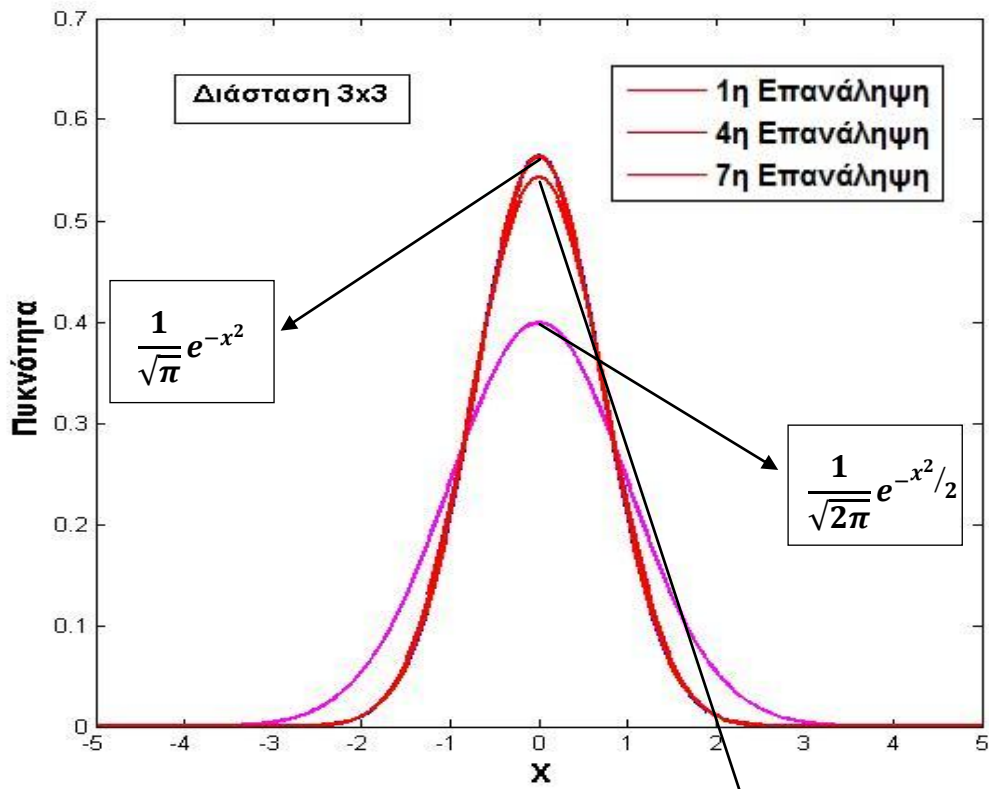
Η πυκνότητα που προκύπτει από τις αντίστοιχες ιδιοσυναρτήσεις φαίνεται στα παρακάτω γραφήματα.

2.3.4 Σύγκλιση της ιδιοκατάστασης συναρτήσεων των επαναλήψεων

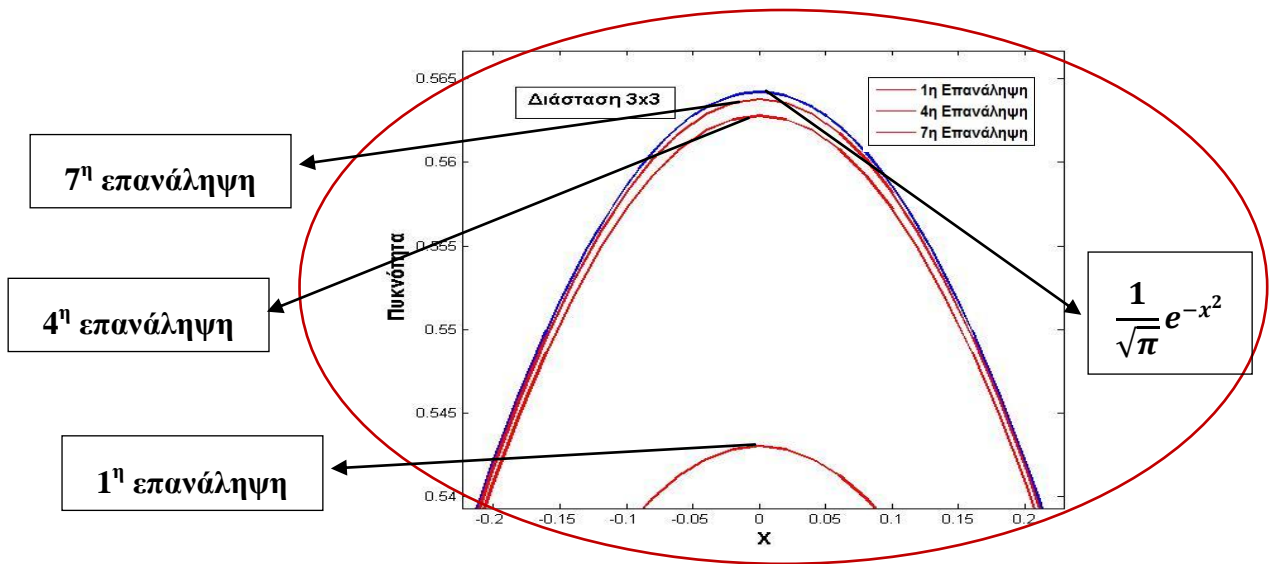


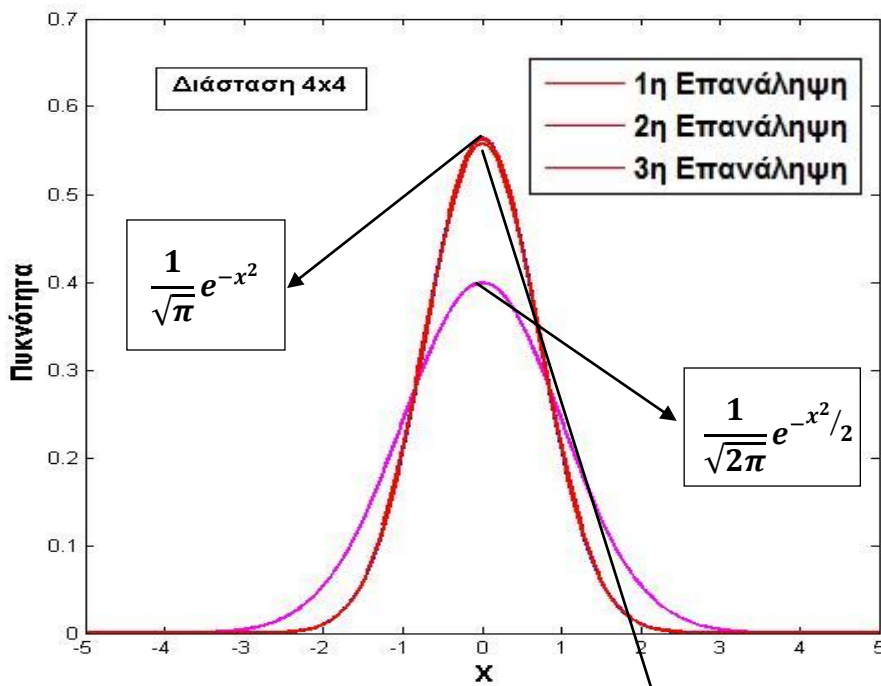
Γράφημα 7: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 2x2.



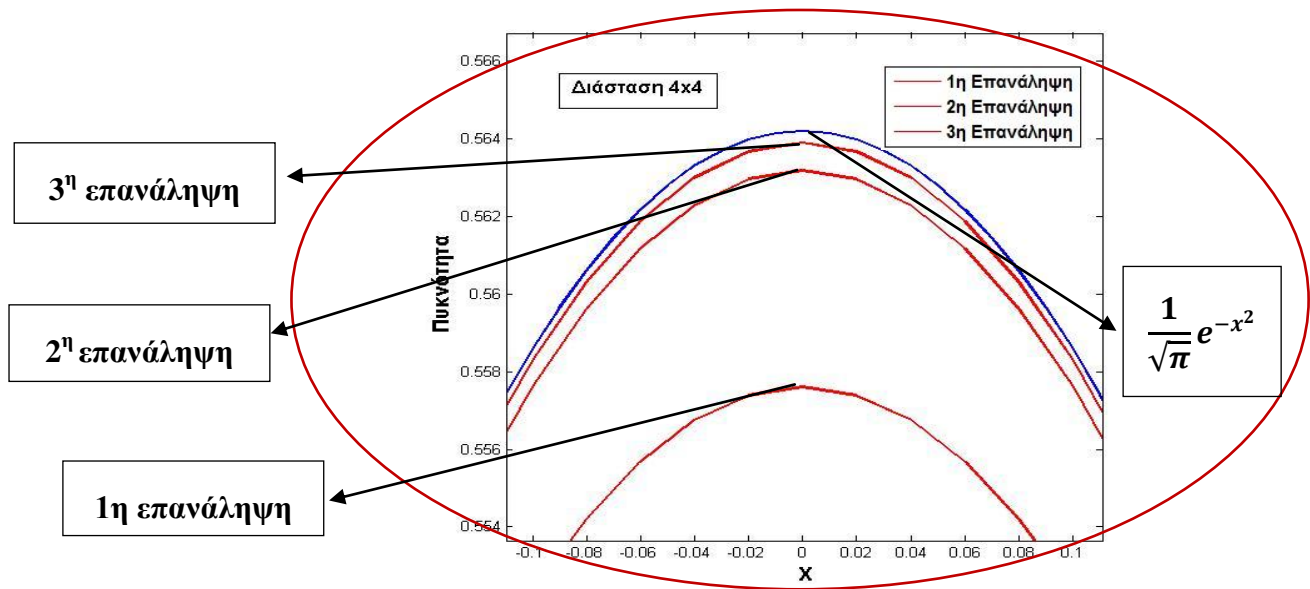


Γράφημα 8: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 3x3.





Γράφημα 9: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 4x4.



2.4 Αναρμονικό δυναμικό

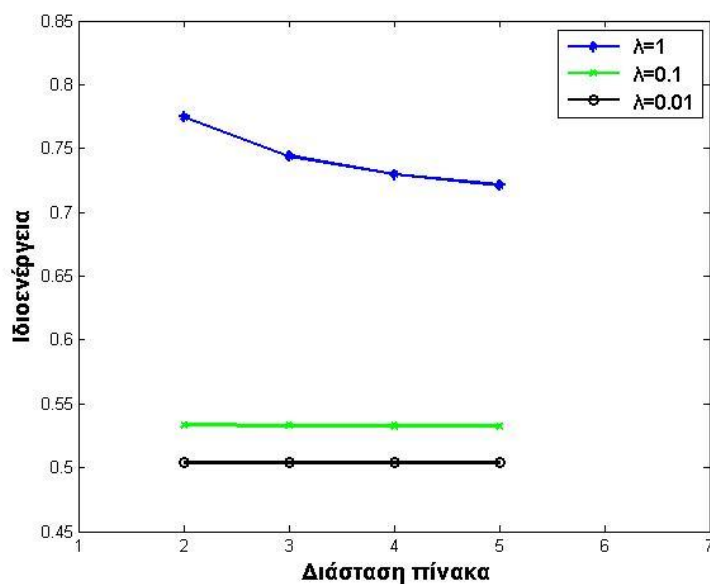
Στην περίπτωση του αναρμονικού δυναμικού,

$$H = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 (1 + \lambda x^2),$$

δεν έχουμε δυνατότητα αναλυτικής λύσης και συνεπώς πρέπει να λυθεί το πρόβλημα αριθμητικά.

Στο παρακάτω γράφημα φαίνεται η ιδιοενέργεια συναρτήσει της διάστασης του χώρου που θεωρώ, για τρεις τιμές του λ . Στην περίπτωση αυτή η αρχική συνάρτηση που επέλεξα ήταν η $\Psi_0 = e^{-x^2}/2/\sqrt{\pi}$.

2.4.1 Σύγκλιση της ιδιοενέργειας συναρτήσει της διάστασης του χώρου

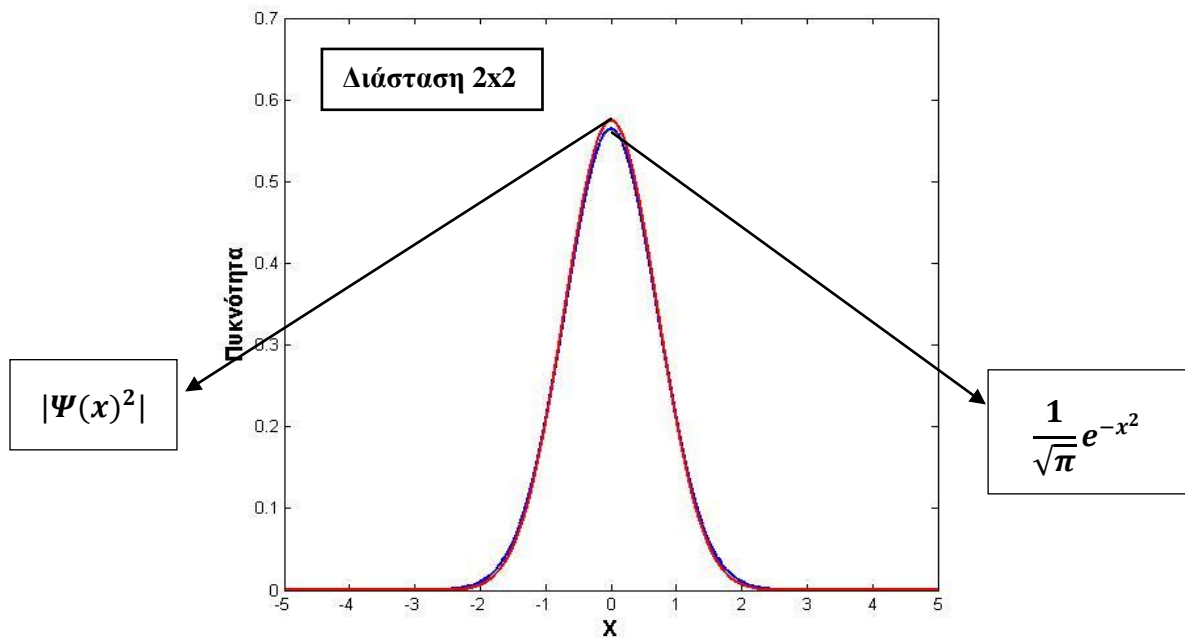


Γράφημα 10: Ιδιοενέργειες για ένα αναρμονικό δυναμικό, με $\lambda = 1, 0.1$ και 0.01 , συναρτήσει της διάστασης των πινάκων.

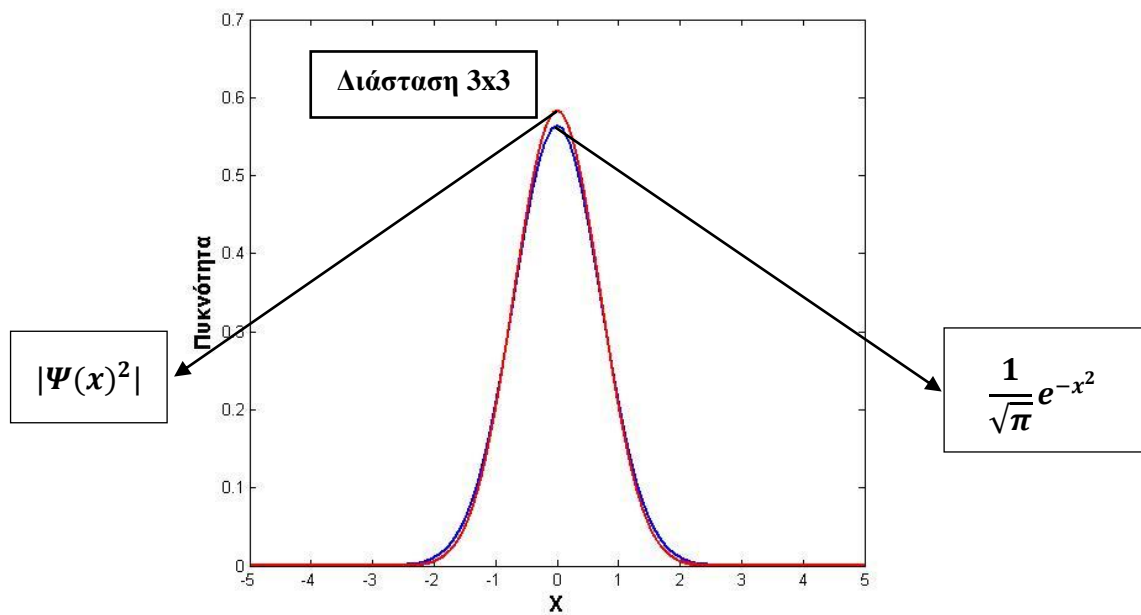
Μέγεθος πίνακα	$\lambda=1$	$\lambda=0.1$	$\lambda=0.01$
2x2	0.774834164345037	0.533490922462263	0.503692831164732
3x3	0.744093745978097	0.532863017975322	0.503686890175073
4x4	0.729617307692031	0.532701599280880	0.503686830854923
5x5	0.721306684261723	0.532659856593439	0.503686836078025

Πίνακας 3: Αποτελέσματα για τις ιδιοενέργειες, αναρμονικό δυναμικό.

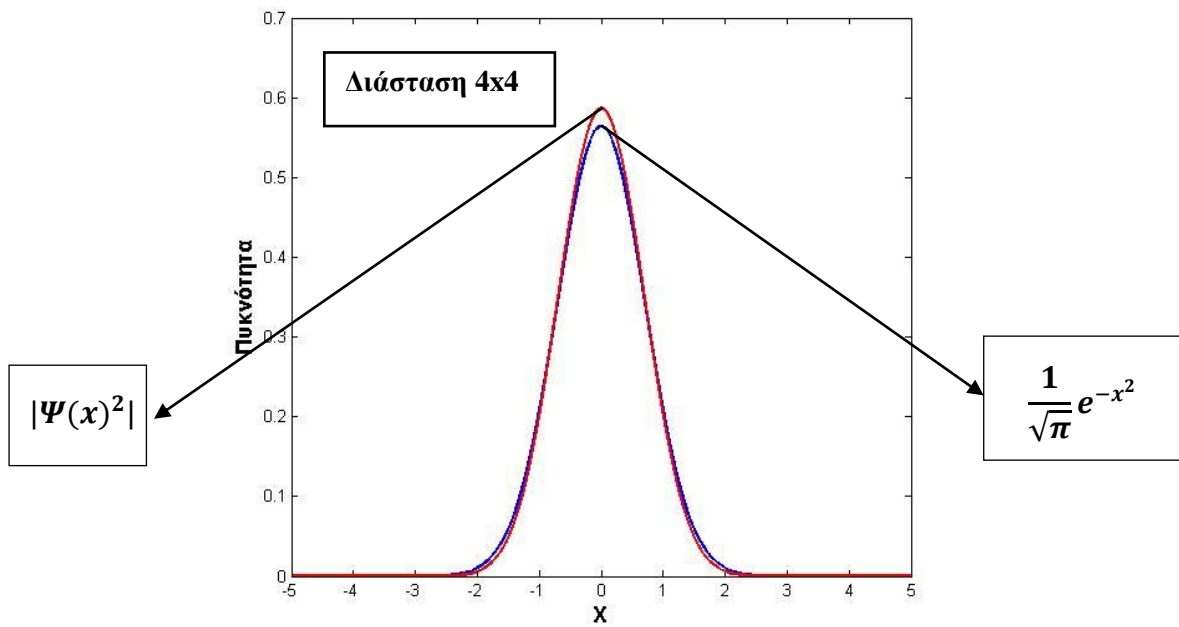
2.4.2 Σύγκλιση της ιδιοκατάστασης συναρτήσει της διάστασης του χώρου



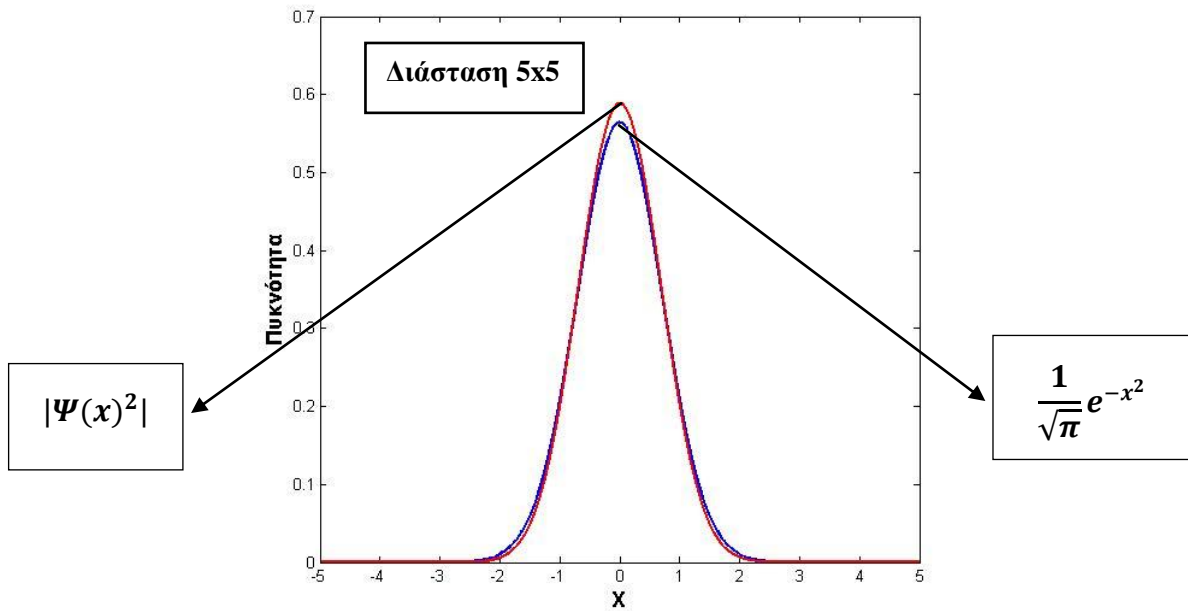
Γράφημα 11: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 2x2, με $\lambda=0.1$.



Γράφημα 12: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 3x3, με $\lambda=0.1$.



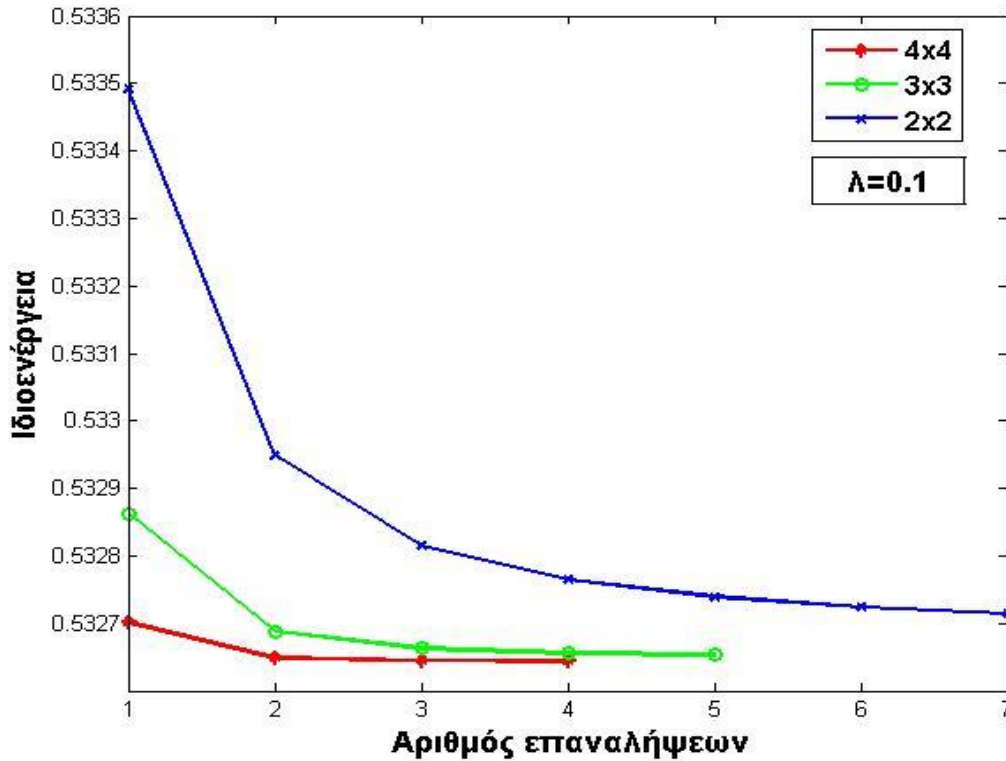
Γράφημα 13: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 4x4, με $\lambda=0.1$.



Γράφημα 14: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 5x5, με $\lambda=0.1$.

2.4.3 Σύγκλιση της ιδιοενέργειας συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων

Εφαρμόζοντας το επαναληπτικό σχήμα μπορούμε να βελτιώσουμε την ακρίβεια της ιδιοτιμής. Αυτό φαίνεται στο πιο κάτω γράφημα, για τρεις διαφορετικές τιμές της διάστασης του χώρου.

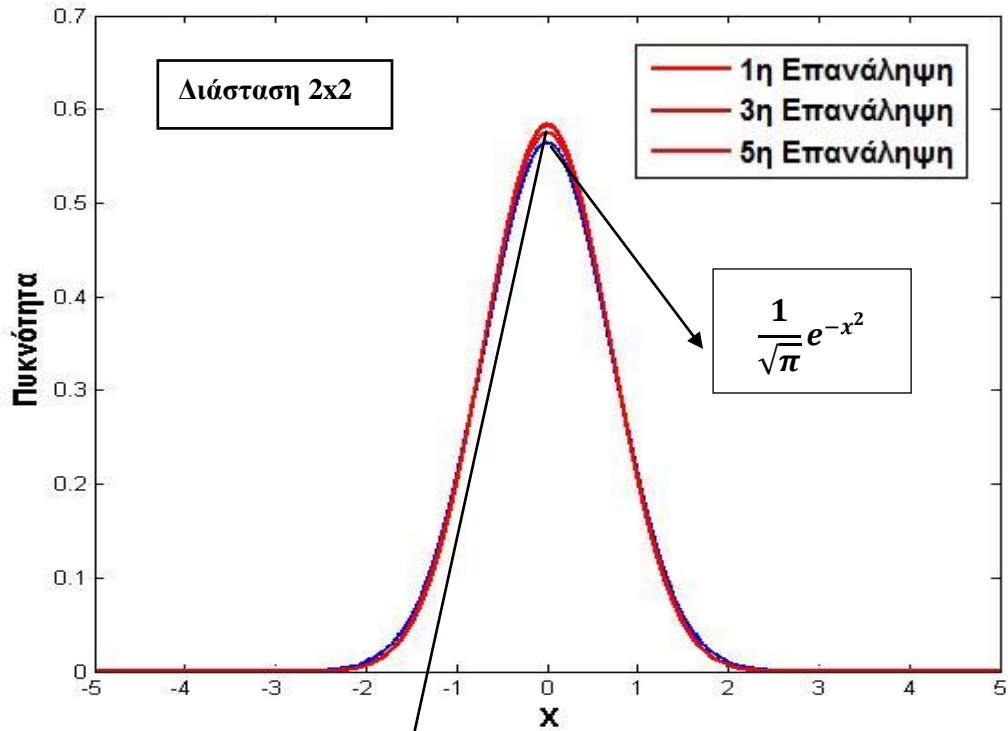


Γράφημα 15: Ιδιοενέργειες συναρτήσει του αριθμού των επαναλήψεων, για $\lambda = 0.1$.

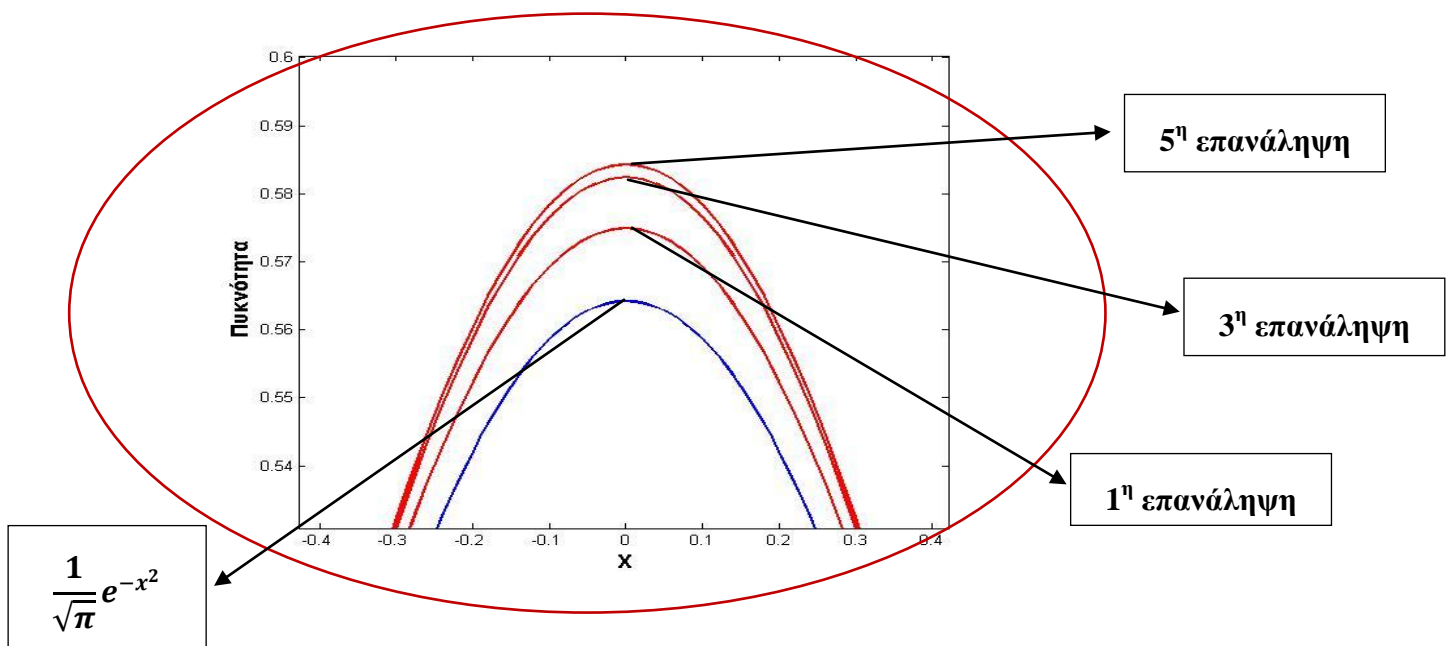
Επανάληψη	2x2	3x3	4x4
1	0.533490922462263	0.532863017975322	0.532701599280880
2	0.532947946508642	0.532687836843712	0.532648798544002
3	0.532815053345800	0.532662955669451	0.532645142643778
4	0.532764827410663	0.532656034249410	0.532644215886918
5	0.532738958774232	0.532652812699794	-
6	0.532723681553776	-	-
7	0.532713693730486	-	-

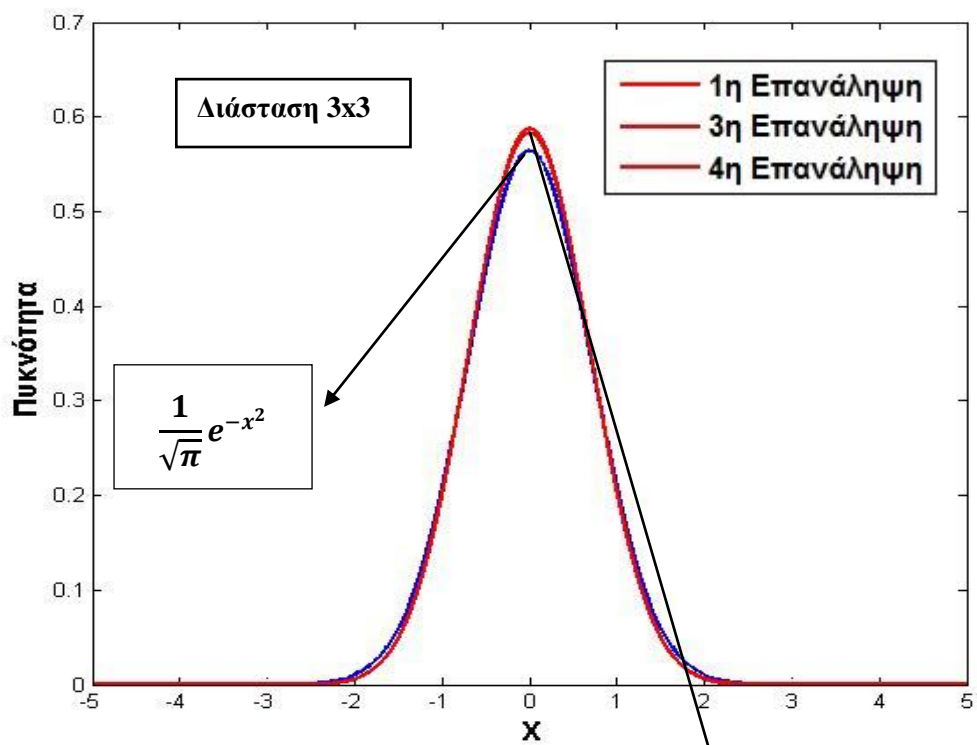
Πίνακας 4: Αριθμητικά αποτελέσματα για τις ιδιοενέργειες, με $\lambda = 0.1$.

2.4.4 Σύγκλιση της ιδιοκατάστασης συναρτήσεως του αριθμού των επαναλήψεων

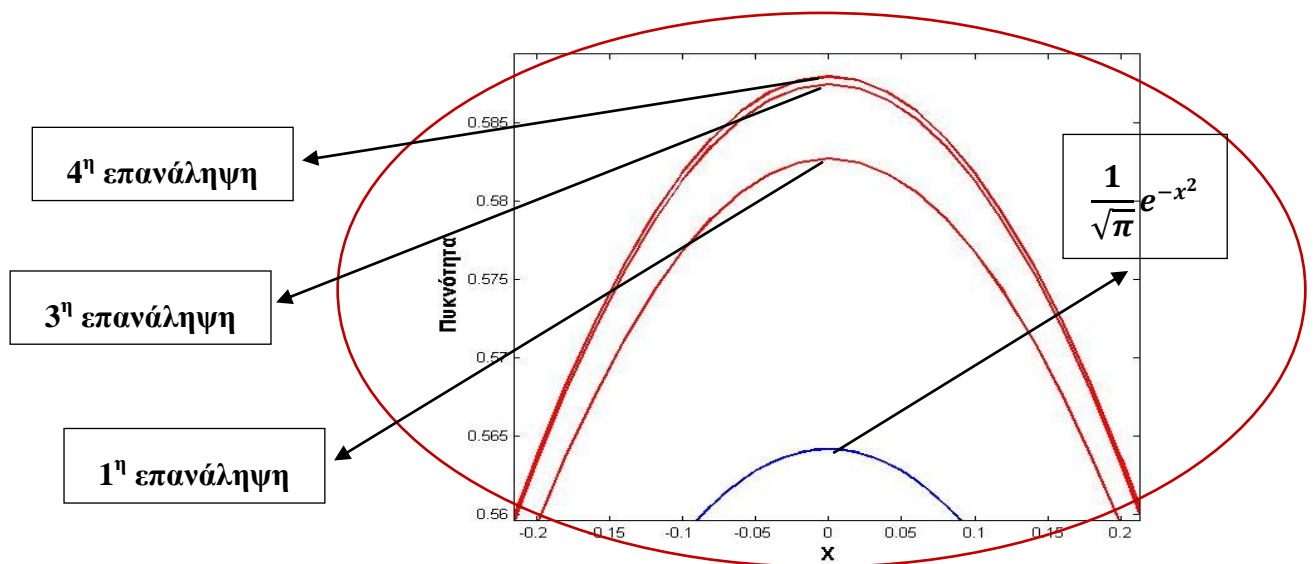


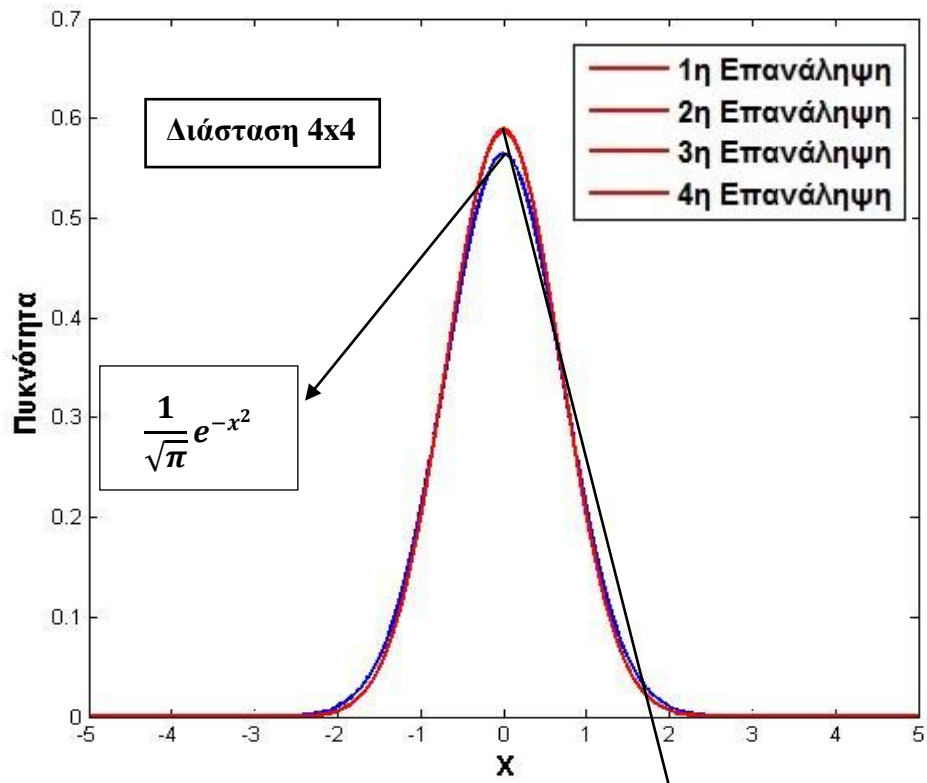
Γράφημα 16: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 2x2, με $\lambda=0.1$.



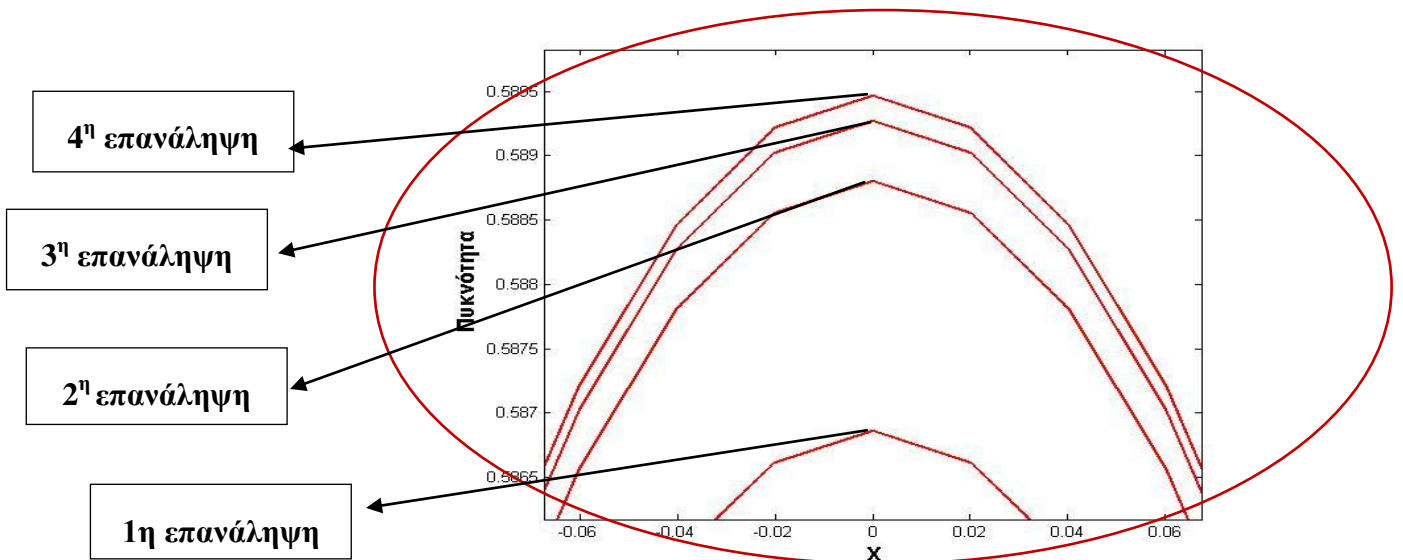


Γράφημα 17: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 3x3, με $\lambda=0.1$.





Γράφημα 18: Πυκνότητα ιδιοκατάστασης για πίνακα διάστασης 4x4, με $\lambda=0.1$.



2.5 Ιδιοκαταστάσεις και ιδιοενέργειες για δύο διαφορετικά εξωτερικά δυναμικά

Τέλος, συνέκρινα τις ιδιοτιμές και τις ιδιοκαταστάσεις για τα δυο διαφορετικά δυναμικά, $V = x^2/2$ και $V = x^2(1 + \lambda x^2)/2$, με $\lambda = 0.1$. Η σύγκριση φαίνεται πιο κάτω. Όσο πιο γρήγορα απειρίζεται το δυναμικό, το «εύρος» της κυματοσυνάρτησης μειώνεται και το μέγιστό της αυξάνεται (λόγω της διατήρησης της πιθανότητας).

Χρησιμοποιώντας θεωρία διαταραχών βρίσκουμε ότι για $\lambda \ll 1$, η διόρθωση στην ιδιοενέργεια είναι $3\lambda/8$,

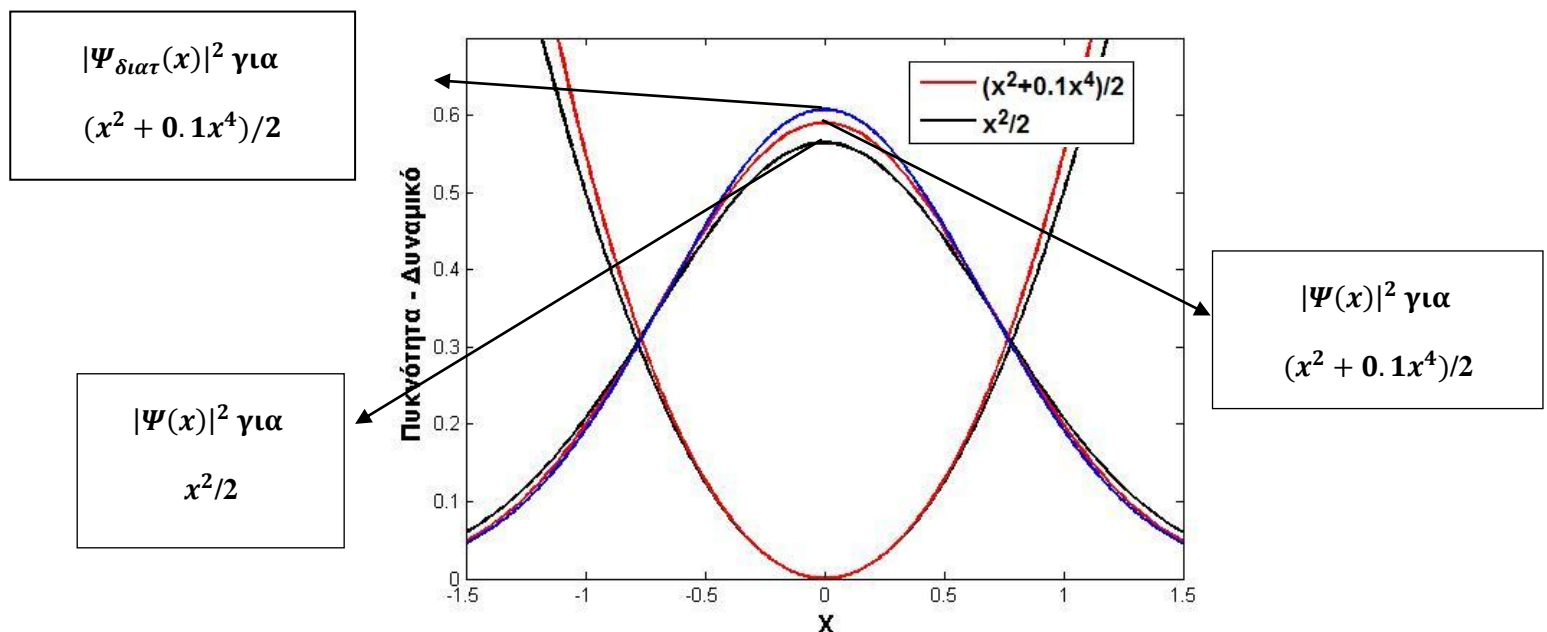
$$E_{\text{διατ}} = \frac{1}{2} + \frac{3}{8}\lambda,$$

συν όρους τάξεως $\lambda^2 (= 0.01)$. Χρησιμοποιώντας αυτό το αποτέλεσμα βρίσκω ότι η ιδιοενέργεια είναι $43/80 = 0.5375$. Το αποτέλεσμα του αριθμητικού υπολογισμού μου είναι περίπου 0.5327. Η διαφορά 0.0048 είναι πράγματι τάξεως λ^2 .

Τέλος, η διόρθωση στην ιδιοσυνάρτηση είναι

$$\Psi_{\text{διατ}}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2/2} [1 - 3\lambda(2x^2 - 1)/8].$$

Και η διόρθωση αυτή είναι συνεπής με το αριθμητικό αποτέλεσμα, όπως φαίνεται πιο κάτω.



Γράφημα 19: Πυκνότητα των δυο ιδιοκαταστάσεων (για τα δύο δυναμικά) και τα δύο δυναμικά.

Δυναμικό	Ιδιοενέργεια
$V(x) = (x^2 + 0.1 x^4)/2$	0.53264294599645119796682193657763
$V(x) = x^2/2$	0.500000000097826331603636005732367

Πίνακας 5: Χαμηλότερη ιδιοτιμή της ενέργειας για τα δύο εξωτερικά δυναμικά.

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στην εργασία μου ανέπτυξα έναν κώδικα, ο οποίος ουσιαστικά γενικεύει την μέθοδο της διάδοσης σε φανταστικό χρόνο. Η μέθοδος διάδοσης σε φανταστικό χρόνο είναι μια από τις κλασικές μεθόδους, η οποία – μεταξύ άλλων – χρησιμοποιείται και στην επίλυση προβλημάτων ιδιοτιμών της εξίσωσης του Schrödinger, που αποτελεί ένα βασικό πρόβλημα στην κβαντική θεωρία.

Παρότι ορισμένα πρώτα αποτελέσματα που έχω επιβεβαιώνουν το γεγονός ότι η μεθόδός μου υπερτερεί έναντι της «κλασικής», δεν μπορώ να ισχυρισθώ με βεβαιότητα ότι ισχύει αυτό. Για να γίνει αυτό, απαιτείται μια πολύ πιο αναλυτική και ενδελεχής δουλειά.

Ένα ανοικτό πρόβλημα που θα μπορούσε επίσης να αποτελέσει επέκταση του παρόντος, είναι η λύση της αντίστοιχης μη-γραμμικής εξίσωσης του Schrödinger, η οποία είναι γνωστό ότι δίδει πολύ ενδιαφέροντα αποτελέσματα, όπως, για παράδειγμα, σολιτονικές λύσεις, κ.λπ. Ούτε σε αυτό το θέμα έχω κάνει κάτι, ωστόσο θα μπορούσε κανείς να σκεφθεί τρόπους χειρισμού του μη-γραμμικού όρου, ώστε να γίνει δυνατή η χρήση της μεθόδου και σε μη-γραμμικά προβλήματα.

Πέρα από τα πιθανά μελλοντικά σχέδια και τις ενδεχόμενες ιδέες, ο κώδικας που ανέπτυξα ελέγχθηκε ήδη σε δύο διαφορετικά εξωτερικά δυναμικά. Οι έλεγχοι που έχω κάνει επιβεβαιώνουν την σύγκλιση της αρχικής κυματοσυνάρτησης στην ακριβή λύση, τόσο ως προς τη διάσταση του χώρου, όσο και ως προς τον αριθμό των επαναλήψεων.

Τέλος, η σύγκριση που έχω κάνει με γνωστά αναλυτικά αποτελέσματα επιβεβαιώνει την αριθμητική του ακρίβεια. Συνεπώς, αν μη τι άλλο, αποτελεί μια εναλλακτική – και ενδεχομένως βελτιωμένη – μέθοδο λύσης της γραμμικής εξίσωσης του Schrödinger.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Χ. Χαραλάμπους, Α. Φωτιάδης, Γραμμική Άλγεβρα
2. Κβαντικοί Αλγόριθμοι – Κβαντικοί Υπολογιστές, Μεταπτυχιακή Διπλωματική Εργασία, Κουρτέλης Αλέξιος, Πανεπιστήμιο Μακεδονίας
3. Κβαντομηχανική I – Κυριάκος Ταμβάκης, Πανεπιστήμιο Κύπρου
4. Κβαντομηχανική I, Στέφανος Τραχανάς, ΗΡΑΚΛΕΙΟ 2005
5. E. R. Gagliano, E. Dagotto, A. Moreo, and F. C. Alcaraz, Phys. Rev. B **34**, 1677 (1986)

3 ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

3.1 Κώδικας MATLAB

```
clear all
syms x
format long

H0f=exp(-x^2/4);

H1f=-diff(diff(H0f,x))/2+(H0f.*x.^2)/2;
H2f=-diff(diff(H1f,x))/2+(H1f.*x.^2)/2;
H3f=-diff(diff(H2f,x))/2+(H2f.*x.^2)/2;
H4f=-diff(diff(H3f,x))/2+(H3f.*x.^2)/2;
H5f=-diff(diff(H4f,x))/2+(H4f.*x.^2)/2;

N00=matlabFunction(H0f*H0f);
N01=matlabFunction(H0f*H1f);
N02=matlabFunction(H0f*H2f);
N03=matlabFunction(H0f*H3f);
N04=matlabFunction(H0f*H4f);
N05=matlabFunction(H0f*H5f);
N11=matlabFunction(H1f*H1f);
N12=matlabFunction(H1f*H2f);
N13=matlabFunction(H1f*H3f);
N14=matlabFunction(H1f*H4f);
N15=matlabFunction(H1f*H5f);
N22=matlabFunction(H2f*H2f);
N23=matlabFunction(H2f*H3f);
N24=matlabFunction(H2f*H4f);
N25=matlabFunction(H2f*H5f);
N33=matlabFunction(H3f*H3f);
N34=matlabFunction(H3f*H4f);
N35=matlabFunction(H3f*H5f);
N44=matlabFunction(H4f*H4f);
N45=matlabFunction(H4f*H5f);
N55=matlabFunction(H5f*H5f);

q00=integral(N00,-100,100);
q01=integral(N01,-100,100);
q02=integral(N02,-100,100);
q03=integral(N03,-100,100);
q04=integral(N04,-100,100);
q05=integral(N05,-100,100);
q11=integral(N11,-100,100);
q12=integral(N12,-100,100);
```

```

q13=integral(N13,-100,100);
q14=integral(N14,-100,100);
q15=integral(N15,-100,100);
q22=integral(N22,-100,100);
q23=integral(N23,-100,100);
q24=integral(N24,-100,100);
q25=integral(N25,-100,100);
q33=integral(N33,-100,100);
q34=integral(N34,-100,100);
q35=integral(N35,-100,100);
q44=integral(N44,-100,100);
q45=integral(N45,-100,100);
q55=integral(N55,-100,100);

```

```

A=sym([q00 q01 q02 q03 q04;
      q01 q11 q12 q13 q14;
      q02 q12 q22 q23 q24;
      q03 q13 q23 q33 q34;
      q04 q14 q24 q34 q44]) ;

```

```

B=sym([q01 q02 q03 q04 q05;
      q02 q12 q13 q14 q15;
      q03 q13 q23 q24 q25;
      q04 q14 q24 q34 q35;
      q05 q15 q25 q35 q45]);

```

```

C=inv(A)*B;

```

```

[V,D]=eig(C)

```

```

H0f=V(1,1)*H0f+V(2,1)*H1f+V(3,1)*H2f+V(4,1)*H3f+V(5,1)*H4f;
H0f2=matlabFunction(H0f*H0f);
norm=integral(H0f2,-100,100);
simplify(H0f/norm^0.5)

```