

Maticové elementy v kvantové fyzice

Vojtěch Horný

16. prosince 2011

Abstrakt

Tato dokumentace popisuje zápočtový program pro předmět 12POAL - Počítačová algebra vyučovaný v zimním semestru roku 2011 na FJFI ČVUT.

Zadání

Sestavte program pro výpočet maticových elementů

$$M_{l_1, l_2}^{n_1, n_2}(l; R) = \frac{1}{R^{l+1}} \int_0^R x^l P_{l_1}^{n_1}(x) P_{l_2}^{n_2}(x) dx + R^l \int_R^\infty \frac{1}{x^{l+1}} P_{l_1}^{n_1}(x) P_{l_2}^{n_2}(x) dx, \quad (1)$$

kde

$$P_l^n = \frac{Q_l^n}{\|Q_l^n\|}, \text{ přičemž } \|f\|^2 = \int_0^\infty f^2(r) r^2 dr, \quad (2)$$

$$Q_l^n(r) = L_{2l+1}^{n+l} \left(\frac{2r}{n} \right) r^l e^{-r/n}, \quad (3)$$

$$L_j^k = \frac{d^j}{dr^j} \left(e^r \frac{d^k (r^k e^{-r})}{dr^k} \right). \quad (4)$$

Pro vstupní parametry platí $n_1 > 0$, $n_2 > 0$, $l_1 \geq 0$, $l_2 \geq 0$ a dále $n_1 > l_1$, $n_2 > l_2$, $l_1 - l_2 \leq l \leq l_1 + l_2$.

Popis programu

Sestavený program byl vytvořen v programu Maple 13 a včetně tohoto textu je vystaven v adresáři `~horny/public_html/POAL/zapocet` v UnixLabu.

Funkce M přiřadí zadaným parametrům svou výslednou hodnotu. Pořadí parametrů je n_1, l_1, n_2, l_2, l, R . Proměnnou R je možno ponechat jako parametr, výsledek bude zobrazen v závislosti na něm. Takto je to uděláno v ilustračním příkladu na konci dokumentu.

Vysvětlení jednotlivých pomocných příkazů

První řádek definuje funkci L podle vztahu (4). Operátor `diff` s druhým argumentem `r$j` zderivuje první argument j -krát podle r .

Druhý řádek zavádí funkci Q z funkce L podle vztahu (3). Je důležité nejprve vyhodnotit funkci L v pomocné proměnné x a teprve až poté za pomocnou proměnnou pomocí příkazu `subs` dosadit její argument $2r/n$.

Dále je nadefinován kvadrát normy funkce *norm2* pro potřebu zavedení funkce *P* podle vztahů (2). Je třeba dbát na to, aby argumentem funkce pro výpočet normy byla funkce v proměnné *r*.

Funkce *P* je pak zavedena jednoduchým vydělením hodnoty funkce *Q* svou normou.

Zavedení funkce *M*

Funkce *M* je zavedena pomocí rozdělovače *piecewise*. Pokud jsou splněny podmínky mezi vstupními argumenty, funkce vrátí výsledek ve formátu

$$k_1 P(R) e^{k_2 R} + f(R).$$

Pokud podmínky splněny nejsou, vrátí chybovou hlášku.

Příklady užití

V závěru souboru je ilustrován výpočet pro několik kombinací vstupních parametrů. Platí například

$$M(2, 1, 1, 0, 1, R) = -\frac{2}{243} \frac{\sqrt{6} (9 R^2 + 12 R + 16) (3 R + 4) e^{-3/2 R}}{R^2} + \frac{128}{243} \frac{\sqrt{6}}{R^2}. \quad (5)$$

Na posledním řádku je možno zadat své vlastní parametry.