Подробное объяснение численного решения задачи о прямоугольной потенциальной яме

1. Физическая постановка задачи

Частица массы m находится в одномерной потенциальной яме с прямоугольным профилем:

$$V(x) = \begin{cases} -U_0, & |x| < \frac{a}{2}, \\ 0, & |x| \geq \frac{a}{2}, \end{cases}$$

где:

- $U_0 > 0$ — глубина потенциальной ямы,
- a — ширина ямы.

Цель — найти:

1. Собственные энергии E (уровни энергии) связанных состояний ($E < 0$),
2. Собственные функции $\psi(x)$, которые описывают вероятность нахождения частицы в точке x.

Решение требует численного анализа уравнения Шрёдингера.

2. Уравнение Шрёдингера

Уравнение Шрёдингера в стационарной форме:

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

где:

- $\hbar$ — приведённая постоянная Планка,
- m — масса частицы,
- $\psi(x)$ — волновая функция,
- E — собственное значение энергии.

Для решения этого уравнения нужно аппроксимировать вторую производную и преобразовать его в матричную форму.

3. Дискретизация пространства

Пространство x разбивается на N узлов с шагом Δx:

$$x_i = -\frac{L}{2} + i \cdot \Delta x, \quad \Delta x = \frac{L}{N},$$

где:

- $L = 3a$ — длина всей области, включающая яму и её окружение,
- N — число точек сетки.

Значения потенциала $V(x)$ определяются для каждого узла:

$$V(x_i) = \begin{cases} -U_0, & |x_i| < \frac{a}{2}, \\ 0, & |x_i| \geq \frac{a}{2}. \end{cases}$$

4. Аппроксимация уравнения Шрёдингера

Вторая производная в уравнении Шрёдингера аппроксимируется методом конечных разностей:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \approx \frac{\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}}{\Delta x^2}.$$

Подставляя это в уравнение, получаем систему линейных уравнений:

$$\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}(\psi_{i-1} - 2\psi_i + \psi_{i+1}) + V(x_i)\psi_i = E\psi_i.$$

Это переписывается в матричной форме:

$$H\psi = E\psi,$$

где H — матрица Гамильтониана.

5. Матрица Гамильтониана

Общая структура

Матрица H состоит из двух частей:

$$H = T + V,$$

где:

- T — матрица кинетической энергии,
- V — диагональная матрица потенциала.

Матрица кинетической энергии

Кинетическая энергия записывается как:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}.$$

В дискретной форме:

$$T_{i,j} = \begin{cases} 2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}, & i = j, \\ -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}, & |i-j| = 1, \\ 0, & |i-j| > 1. \end{cases}$$

Матрица потенциала

Матрица потенциала V является диагональной:

$$V_{i,j} = \begin{cases} V(x_i), & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

Итоговая матрица H

Суммируя T и V, получаем итоговую трёхдиагональную матрицу:

$$H_{i,j} = \begin{cases} 2 \cdot \frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2} + V(x_i), & i = j, \\ -\frac{\hbar^2}{2m\Delta x^2}, & |i - j| = 1, \\ 0, & |i - j| > 1. \end{cases}$$

6. Решение задачи на собственные значения

Решение уравнения $H\psi = E\psi$ с помощью функции численного анализа возвращает:

- Собственные значения E — уровни энергии,
- Собственные векторы ψ — волновые функции.

7. Нормировка волновых функций

Каждая волновая функция $\psi(x)$ нормируется:

$$\sum_{i=0}^{N-1} |\psi_i|^2 \Delta x = 1.$$

8. Фильтрация связанных состояний

Отбираются состояния с энергией $E < 0$, которые соответствуют связанным состояниям частицы в яме.

9. Визуализация

Графики показывают:

1. Потенциал $V(x)$,
2. Волновые функции $\psi(x)$, смещённые вверх на уровень энергии E.