Решение уравнения Шредингера, как задачи на собственные значения

Терентьев Т.Н

24 ноября 2021 г.

1 Алгоритм решения

Имеем:

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{x^2} + V)\psi = E\psi \tag{1}$$

С граничными условиями:

$$\psi_0 = 0; \psi_a = 0 \tag{2}$$

где a – конечная точка расчетного отрезка. Распишем производные:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_(i+1) - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{h^2} + V_i\psi_i = E\psi_i \tag{3}$$

Пусть $E_{max} = -\frac{\hbar^2}{2mh^2}$, тогда:

$$E_{max}(\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}) = (E - V_i)\psi_i \tag{4}$$

Приведем это выражение к виду:

$$A_i y_{i-1} - C_i y_i + B_i y_{i+1} = -F_i \tag{5}$$

Где A, B, C – диагонали матрицы, F – правая часть выражения, y – искомая величина. Соединяя уравнения 5и 4, получим:

$$A_i = B_i = E_{max} \tag{6}$$

$$C_i = 2E_{max} - V_i \tag{7}$$

$$F_i = E\psi_i \tag{8}$$

Для нахождения собственного значения E, рассчитаем детерминант матрицы: $|H - E|$, а затем подберем такое значение E, чтобы детерминант был равен нулю: $|H - E| = 0$. Этот этап реализован следующим образом:

```
det = 1
while not -eps < det < eps:      #find E
        if det < -eps or summ > 1+eps:
                E /= 1+10**-3
        elif det > eps or summ < 1-eps:
                E *= 1+10**-3
        det = (multiply_diagonal(A, psi, E) -
                        multiply_diagonal(C, psi, E) +
                        multiply_diagonal(B, psi, E)
        print(det, 'det')
        print(E, 'E\n')
```

После выполнения данного шага собственное значение E будет удовлетворять текущей функции распределения ψ. Для нахождения ψ воспользуемся методом обратных итераций. Предположим, что точки неизвестного распределения y_i образуют между собой прямые, которые можно задать уравнением:

$$y_{i+1} = \alpha_{i+1} y_i + \beta_{i+1} \tag{9}$$

где α и β – коэффициенты. Эти коэффициенты нужно найти для того, чтобы установить неизвестную функцию y. Подставим y_{i+1} из уравнения 5 в 9:

$$y_{i+1} = \frac{-F_i - A_i y_{i-1} + C_i y_i}{B_i} = \alpha_{i+1} y_i + \beta_{i+1} \tag{10}$$

$$(\frac{-C_i}{B_i} + \alpha_{i+1}) y_i = \frac{-A_i}{B_i} y_{i-1} + (\frac{-F_i}{B_i} - \beta_i) \tag{11}$$

$$y_i = \frac{-A_i/B_i y_i}{\alpha_{i+1} - C_i/B_i} + \frac{-F_i/B_i - \beta_{i+1}}{\alpha_{i+1} - C_i/B_i} \tag{12}$$

Подставим полученное выражение в следующее уравнение:

$$y_i = \alpha_i y_{i-1} + \beta_i \tag{13}$$

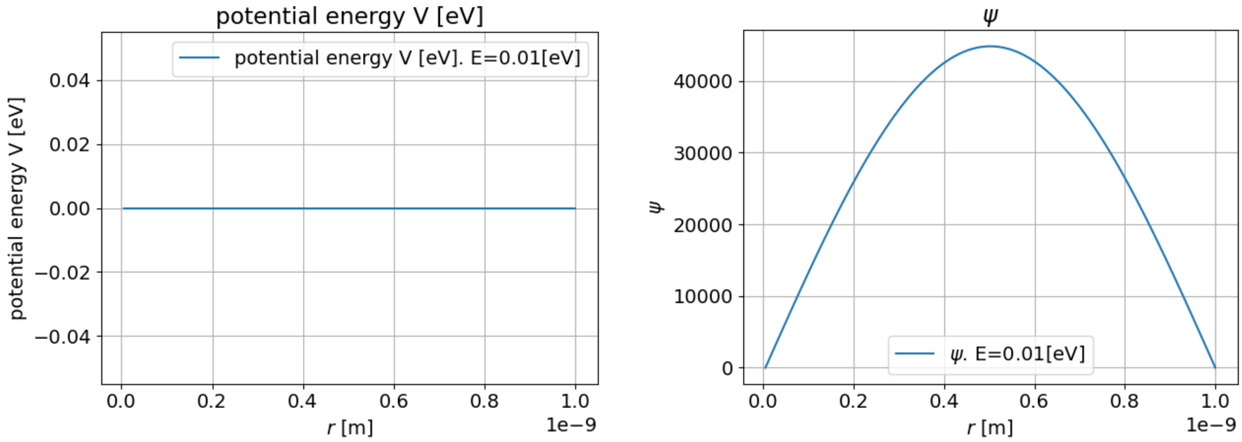
И получим выражения для коэффициентов α и β:

$$\alpha_i = \frac{A_i}{C_i - B_i \alpha_{i+1}} \tag{14}$$

$$\beta_i = \frac{F_i + B_i \beta_{i+1}}{C_i - B_i \alpha_{i+1}} \tag{15}$$

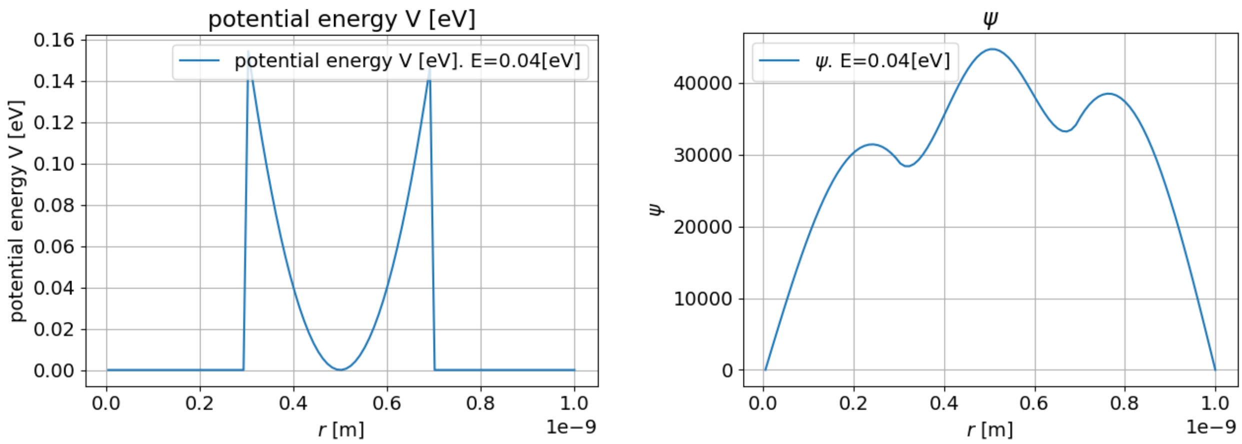
, Имея выражения 14, 15 и граничное условие $\psi_a = 0 => \alpha_a = 0, \beta_a = 0$, мы сможем найти все значения α и β. А имея эти коэффициенты и уравнение 9, получим и искомую функцию y ($y \equiv \psi$). В программе это реализовано следующим образом:

```python
def progonka_start_left(A, B, C, F, RB_Condition_alpha,
                                                RB_Condition_beta, LB_Condition):
        Func = np.zeros(len(r))
        alpha = np.zeros(len(r))
        beta = np.zeros(len(r))
        #RIGHT BORDER CONDITION
        alpha[len(r)-1] = RB_Condition_alpha
        beta[len(r)-1] = RB_Condition_beta
        #CALCULATING ALPHA & BETA FROM R TO 0
        for i in reversed(range(len(r)-1)):
                alpha[i] = A[i]/(C[i]-B[i]*alpha[i+1])
                beta[i] = (F[i]+B[i]*beta[i+1])/(C[i]-B[i]*alpha[i+1])
        #LEFT BORDER CONDITION
        Func[0] = LB_Condition
        #CALCULATING A FUNCTION FROM 0 TO R
        for i in range(len(r)-1):
                Func[i+1] = alpha[i+1]*Func[i]+beta[i+1]
        return Func
```



a) b)

Рис. 1: a) Распределение потенциальной энергии, b) Волновая функция ψ



a) b)

Рис. 2: a) Распределение потенциальной энергии, b) Волновая функция ψ

В итоге мы получим функцию ψ и собственное значение E. Но не забудем про нормировку, так как вероятность нахождения частицы не может быть больше еденицы:

$$\int_0^a \psi^2 = 1 \tag{16}$$

Пронормируем ψ так, чтобы оно удовлетворяло уравнению 16. Теперь необходимо снова рассчитать E и ψ, так как функция изменилась. Этот процесс зацикливаем до тех пор, пока не будет удовлетворено условие 16.

В итоге получим распределения для различных потенциальных энергий V. В данном примере приведен расчет для V=0 (рис. 1) и параболической зависимости V (рис. 2).