

Необходимо решить уравнение Шрёдингера в поле центральных сил с помощью численных методов (метода пристрелки):

$$-\frac{1}{B}\Psi''(x) + F(x)\Psi(x) = \varepsilon\Psi(x),$$

$$r = ax, B = \frac{2ma^2}{\pi\hbar^2}U_0, U_{min} = -U_0, \varepsilon = E/U_0,$$

$$\Psi(0) = 0 \text{ для } \lim_{r \rightarrow 0} r^2 U(r) = 0, \Psi(+\infty) = 0.$$

Согласно варианту (№1):

$$U(r) = U_0 \exp\left(-\frac{r}{a}\right), F(x) = -\exp(-x).$$

Но также проверим работу программы на квантовом осцилляторе с потенциалом:

$$F(x) = \frac{1}{2}x^2.$$

Проверка для квантового осциллятора.

$$n = 0: \varepsilon = 1.514, [a, b] = [10^{-3}, 10], \varepsilon_{min} = 0, \varepsilon_{max} = 2, B = 2.$$

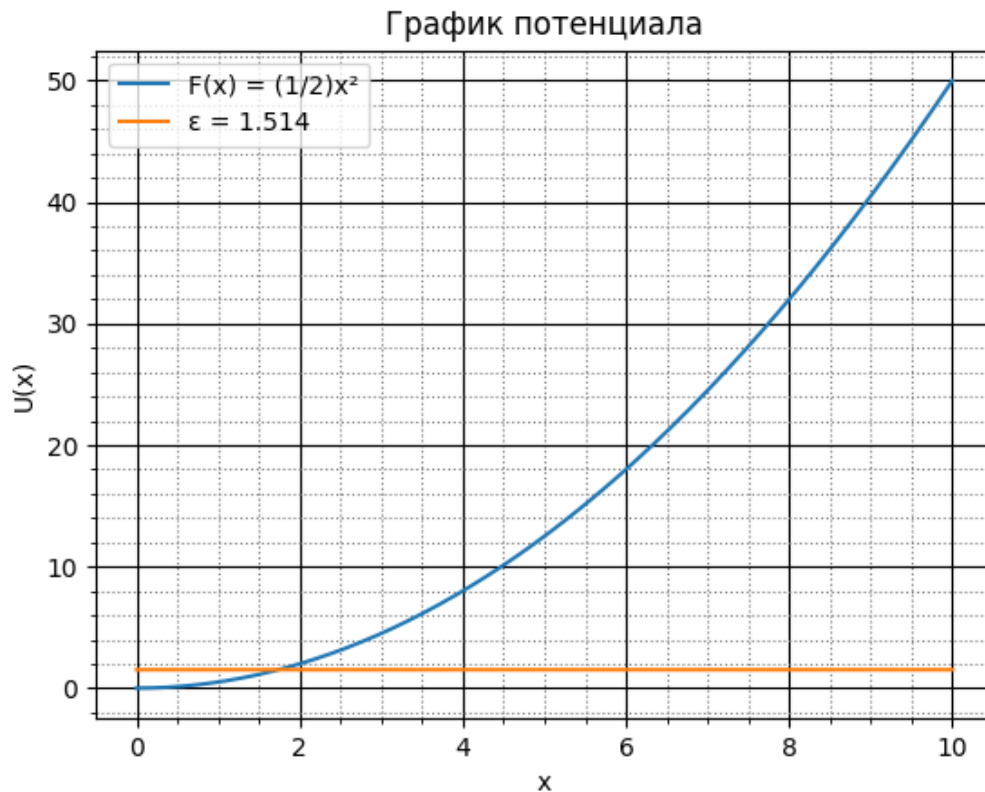


График потенциала квантового осциллятора и нулевой уровень энергии

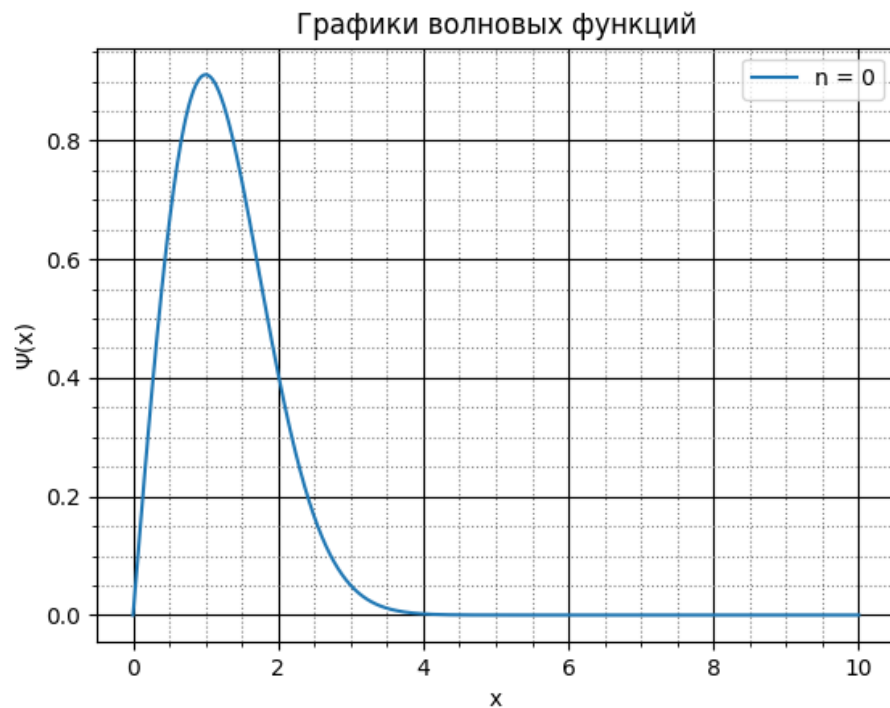
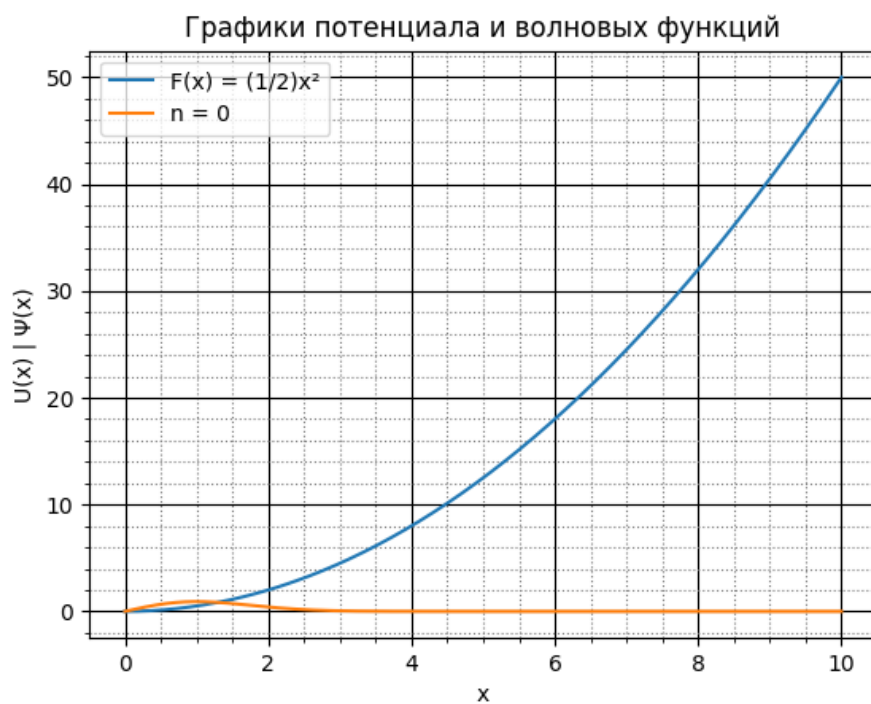


График волновой функции для потенциала квантового осциллятора на нулевом уровне



Графики для данного согласно варианту потенциала: $F(x) = -\exp(-x)$

$n = 0$: $\varepsilon = -0.216$, $[a, b] = [0, 15]$, $\varepsilon_{\min} = -1$, $\varepsilon_{\max} = 0$, $B = 10$.

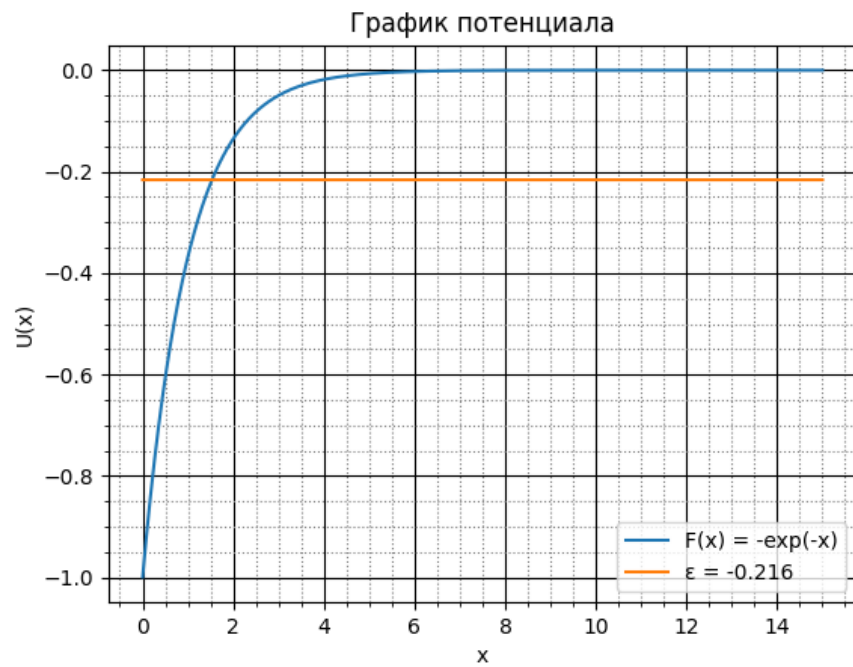
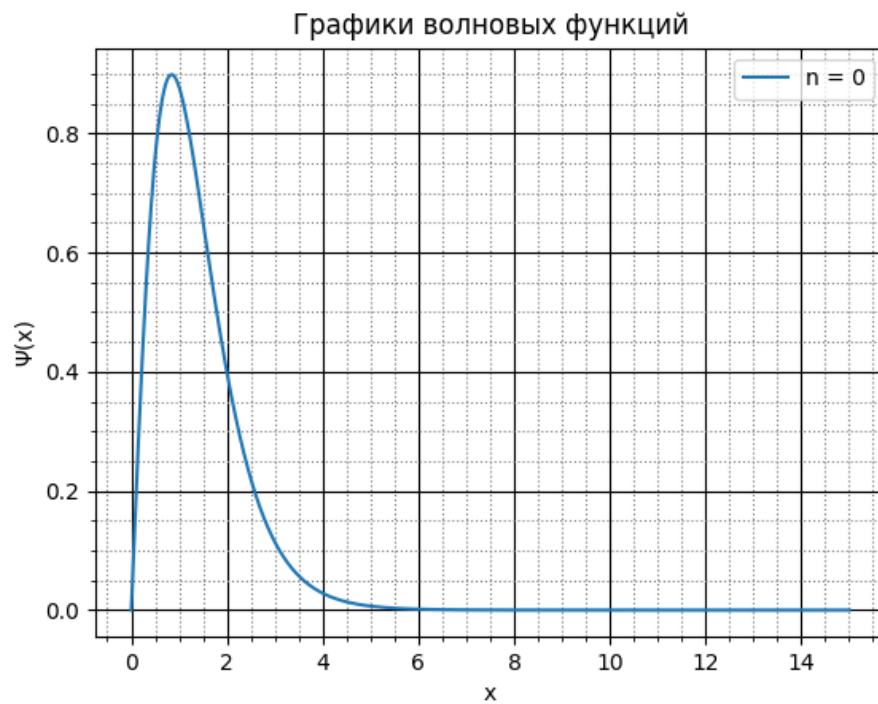
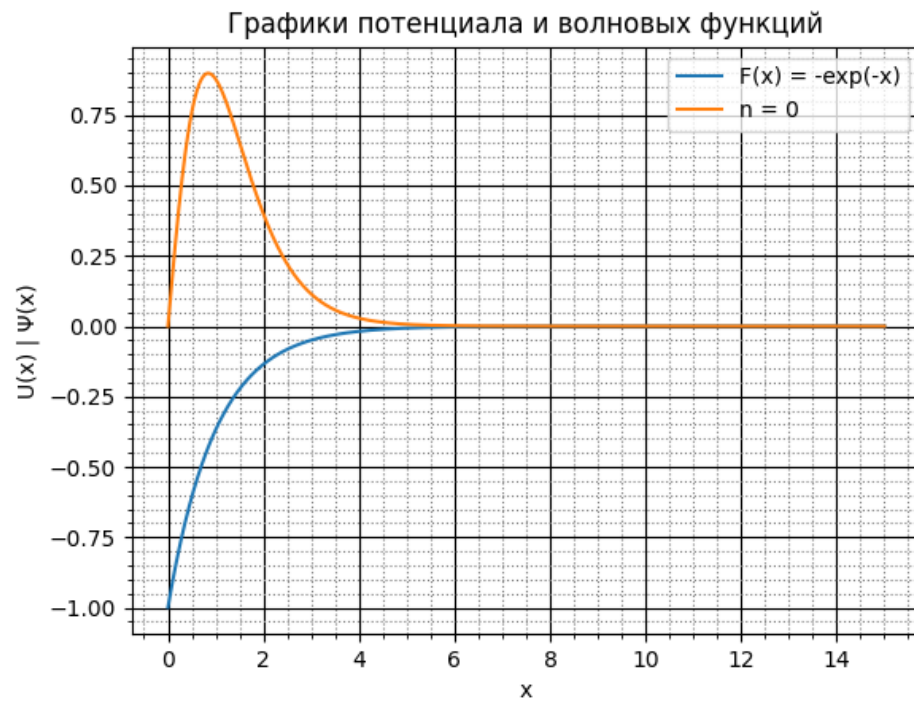


График данного потенциала и нулевой уровень энергии





Потенциал $F(x) = -\exp(-x)$ и волновая функция на одном графике

Алгоритм:

1. Задаем границы интегрирования a , b и количество точек, например, $n = 10000$.
2. Вычисляем все значения потенциала на заданном интервале:
 - a. $h = \frac{b-a}{n-1}$
 - b. $F_i(x_i), i = \overline{0, n-1}, x_i = -a + ih$
3. Задаем минимальное и максимальное значения собственного значения энергии, шаг изменения энергии, а также точность.
4. Примем $B = \frac{2ma^2}{\pi\hbar^2} = 5$.
5. Далее ищем собственное значение энергии и соответствующий набор волновых функций с помощью метода пристрелки:
 - a. $a = \varepsilon_{min}$
 - b. Далее в цикле, пока не будет пересчитан весь интервал энергий от ε_{min} до ε_{max} :
 - i. Находим невязку и соответствующий набор $\Psi(x)$. Нахождение невязки и $\Psi(x)$ описано в шестом пункте.
 - ii. Проверяем условие $\Delta(\varepsilon) < accuracy$. Если условие выполнено, то запоминаем невязку и соответствующий набор $\Psi(x)$. В следующих итерациях, если будет найдено более точное значение, они заменят предыдущие.
 - iii. А когда при очередном значении энергии условие $\Delta(\varepsilon) < accuracy$ не будет выполнено, сочтем, что найдены собственное значение энергии ε и собственный вектор $\Psi(x)$ для i -того уровня энергии.
 - c. После завершения цикла у нас будут найдены ε и наборы точек $\Psi(x)$, которые выводятся в виде численного значения и графика волновой функции соответственно.
6. Описание алгоритма метода пристрелки (поиск невязки и набора $\Psi(x)$):

Интегрируется уравнение:

$$-\frac{1}{B}\chi''(x) + F(x)\chi(x) = \varepsilon\chi(x),$$

Выражаем $\chi''(x) = \frac{\chi_{i+2} - 2\chi_{i+1} + \chi_i}{h^2}$ трёхточечной схемой. Отсюда выразим $\chi_{i+2} = h^2\chi'' + 2\chi_{i+1} - \chi_i$, где $\chi'' = -B(\varepsilon - F_i)\chi_i$.

 - a. Ищем точку поворота. Здесь простой цикл $0 \leq i < n - 2$ в котором ищется точка пересечения потенциальной энергии с осью абсцисс:
 - i. $crossing_{i+2} = \varepsilon - F_{i+2}$
 - ii. $crossing_{i+1} = \varepsilon - F_{i+1}$

- iii. Если переменные пересечений разных знаков, то запоминаем $m = i + 2$ и прерываем цикл. За m в дальнейшем примем левую точку поворота, в которой будет производиться сшивка решений. В противном случае продолжаем цикл и если такая точка не будет найдена, то данный уровень энергии пропускается.
- b. Принимаем $\chi_0 = 0, \chi_1 = 9.999999 \cdot 10^{-10}$.
- c. Далее считаем в цикле χ_i для $0 \leq i < m$:
- $\chi_i'' = -B(\varepsilon - F_i)\chi_i$
 - $\chi_{i+2} = h^2\chi_i'' + 2\chi_{i+1} - \chi_i$
- d. Сохраняем $\vec{\chi}_i = \chi_m, \vec{\chi}_{i-1} = \chi_{m-1}$.
- e. Принимаем $\chi_{n-1} = 0, \chi_{n-2} = 9.999999 \cdot 10^{-10}$.
- f. Далее считаем в цикле χ_i для $i = \overline{n-3, m-1}$:
- $\chi_i = \frac{2\chi_{i+1} - \chi_{i+2}}{1 + h^2 B(\varepsilon - F_i)}$
- g. Сохраняем $\tilde{\chi}_i = \chi_m, \tilde{\chi}_{i-1} = \chi_{m-1}$.
- h. Теперь требуем $\tilde{\chi}_m = \vec{\chi}_m$. Очевидно, что $\vec{\chi}_m = c\tilde{\chi}_m$, поэтому $c = \frac{\vec{\chi}_m}{\tilde{\chi}_m}$.
- i. Далее в цикле $n-3 \leq i < n$ выравниваем левые решения $\chi_i = c\tilde{\chi}_i$ до точки сшивания и также $\tilde{\chi}_{i-1} = c\tilde{\chi}_{i-1}$.
- j. Ищем $\chi_{max} = \max_{0 \leq i < n} |\chi_i|$
- k. Формируем невязку $\Delta(\varepsilon) = \frac{\vec{\chi}_{m-1} - \tilde{\chi}_{m-1}}{\chi_{max}}$
- l. Нормируем решения по формуле $\int_{x_{min}}^{x_{max}} \chi^2(x) dx \approx h \sum_{i=0}^{n-1} \chi_i^2 = 1 \rightarrow$
- $$A = \frac{1}{\sqrt{h \sum_{i=0}^{n-1} \chi_i^2}}$$
- m. Умножаем все значения $\chi(x)$ на коэффициент нормировки A .
- n. Возвращаем функции поиска собственные значения и вектор $\Delta(\varepsilon)$ и $\chi(x)$.