

Домашнее задание №3

Александр Козлов

11 октября 2022 г.

Формулировка задания

Дан гамильтониан одномерной квантово-механической системы с потенциалом в виде гауссовой ямы

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0 e^{-x^2}, \quad (1)$$

где $V_0 < 0$. Требуется вычислить основное состояние с помощью метода простых итераций со сдвигом при значении постоянной связи V_0 , которое поддерживает два состояния дискретного спектра. Исследовать зависимость вычислительных затрат от числа точек сетки.

1 Численное решение

Рассматриваемое уравнение Шрёдингера (УШ) имеет вид

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0 e^{-x^2} \psi = E \psi \quad (2)$$

или

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - V_0 e^{-x^2}) \psi = 0. \quad (3)$$

Стоит заметить, что такое уравнение соответствует обычному одномерному УШ при $\hbar = 1$ и $m = 1/2$.

Прежде всего зададим равномерную сетку

$$x_0 = -R, x_1 = x_0 + \delta, x_2 = x_0 + 2\delta, \dots, x_k = x_0 + k\delta, \dots, x_M = x_0 + M\delta = R \quad (4)$$

с шагом $\delta = 2R/M$, где M — целое положительное число, а R — положительное действительное число. Будем пользоваться численной аппроксимацией второй производной

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{\psi(x_{k+1}) - 2\psi(x_k) + \psi(x_{k-1}))}{\delta^2} + O(\delta^2), \quad k = \overline{1, M-1} \quad (5)$$

и сводить уравнение (2) к задаче диагонализации трёхдиагональной матрицы.

Перед тем, как писать явный вид такой матрицы, необходимо поговорить о том, как будут задаваться граничные условия. Ясно, что волновые функции состояний дискретного спектра будут экспоненциально затухать при больших по абсолютному значению x . Это обстоятельство может быть численно учтено различными вариантами, однако, остановимся на варианте, при котором полагается $\psi(x_0) = \psi(x_M) = 0$. Тогда численное приближение УШ для $k = 1$ примет вид

$$-\frac{\psi(x_2) - 2\psi(x_1)}{\delta^2} + V(x_1) \psi(x_1) = E \psi(x_1). \quad (6)$$

Для $k = M - 1$ получаем аналогичное уравнение

$$-\frac{-2\psi(x_{M-1}) + \psi(x_{M-2}))}{\delta^2} + V(x_{M-1}) \psi(x_{M-1}) = E \psi(x_{M-1}). \quad (7)$$

А для всех остальных k имеем уравнение

$$-\frac{\psi(x_{k+1}) - 2\psi(x_k) + \psi(x_{k-1}))}{\delta^2} + V(x_k) \psi(x_k) = E\psi(x_k). \quad (8)$$

В матричном виде задача записывается так:

$$\begin{pmatrix} 2\delta^{-2} + V(x_1) & -\delta^{-2} & & & \\ -\delta^{-2} & 2\delta^{-2} + V(x_2) & -\delta^{-2} & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -\delta^{-2} & 2\delta^{-2} + V(x_{M-2}) & -\delta^{-2} \\ & & & -\delta^{-2} & 2\delta^{-2} + V(x_{M-1}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \vdots \\ \psi(x_{M-2}) \\ \psi(x_{M-1}) \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi(x_1) \\ \psi(x_2) \\ \vdots \\ \psi(x_{M-2}) \\ \psi(x_{M-1}) \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Таким образом надо диагонализировать симметричную трёхдиагональную матрицу размера $(M-1) \times (M-1)$.

Но мы вместо того, чтобы диагонализировать матрицу

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 2\delta^{-2} + V(x_1) & -\delta^{-2} & & & \\ -\delta^{-2} & 2\delta^{-2} + V(x_2) & -\delta^{-2} & & \\ & & \ddots & & \\ & & & -\delta^{-2} & 2\delta^{-2} + V(x_{M-2}) & -\delta^{-2} \\ & & & -\delta^{-2} & 2\delta^{-2} + V(x_{M-1}) \end{pmatrix}, \quad (10)$$

будем решать задачу более сложным путём — методом последовательных итераций со сдвигом. Для этого, сперва найдём методом простых итераций наибольшее по абсолютному значению собственное значение матрицы \hat{H} E_{\max} . Затем сдвинем спектр матрицы \hat{H} на $E_{\max}/2$, то есть перейдём к рассмотрению матрицы $\hat{H}_* = \hat{H} - E_{\max}/2 \hat{I}$. Найдём методом простых итераций наибольшее по модулю собственное значение новой матрицы.

2 Результаты

Метод простых итераций со сдвигом был применён для определения энергии основного состояния при фиксированных параметрах $R = 6.0$, $V_0 = -5.0$ и при числе итераций, равном 1000, число точек сетки M менялось, что дало зависимость времени вычисления от числа точек сетки, изображённую на Рис. 1.

Кроме того, удалось установить, что увеличение числа точек сетки негативно сказывается на точности решения, что видно на Рис. 2. Это можно связать как с уменьшением точности при вычислении разности двух больших чисел, когда переходят от наибольшего по модулю собственного значения матрицы $\hat{H}_* = \hat{H} - E_{\max}/2 \hat{I}$ к основному состоянию исходной матрицы матрицы \hat{H} .

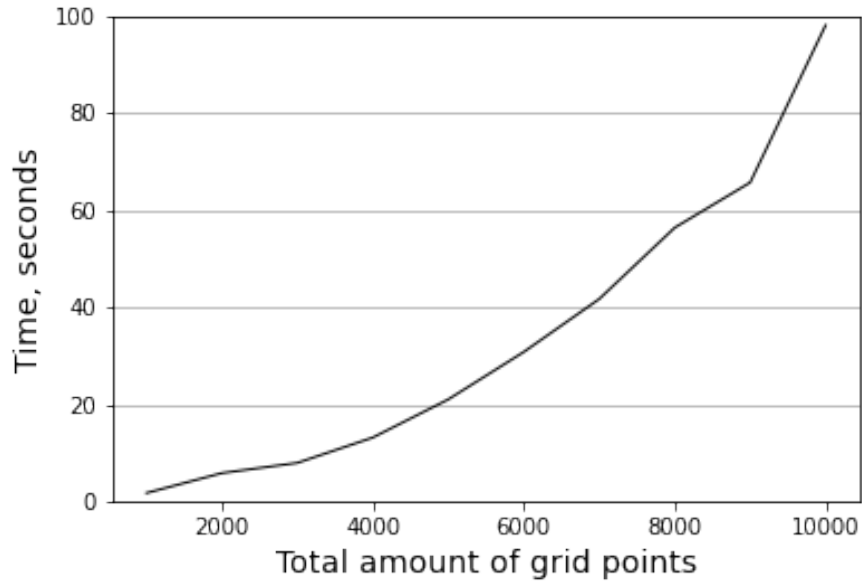


Рис. 1: Зависимость времени работы программы в секундах от числа точек сетки при фиксированных $R = 6.0$, $V_0 = -5.0$ и при 1000 итераций.

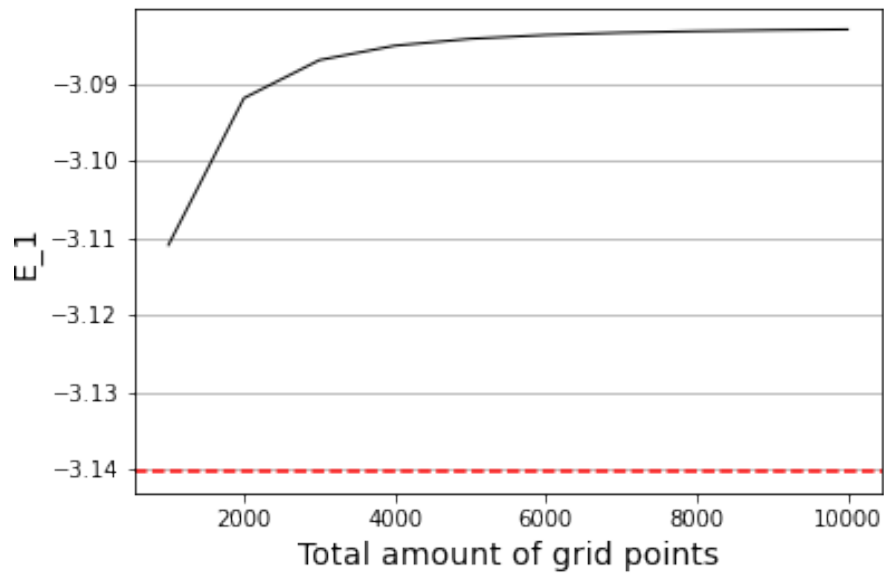


Рис. 2: Зависимость энергии основного состояния от числа точек сетки при фиксированных $R = 6.0$, $V_0 = -5.0$ и при 1000 итераций. Чёрной линией отмечена полученная зависимость, красным пунктиром показано эталонное значение энергии основного состояния, взятое из первого домашнего задания.