

Домашнее задание №1. Диагонализация гамильтониана

Александр Козлов

22 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 сделать следующее.

1. Найти константы связи V_0 , при которых в системе возникает одно, два и три связанных состояния.
2. Исследовать зависимость вычислительных затрат от размера сетки.
3. Исследовать зависимость погрешности энергий состояний от размера сетки и границ бокса.

1 Дискретизация задачи

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:

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

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

2 Количество связанных состояний в зависимости от константы связи

При размере сетки $M = 10000$ и ширине бокса $R = 15$ была получена зависимость числа связанных состояний от параметра связи, показанная на Рис. 1. Для оценки правильности полученных результатов

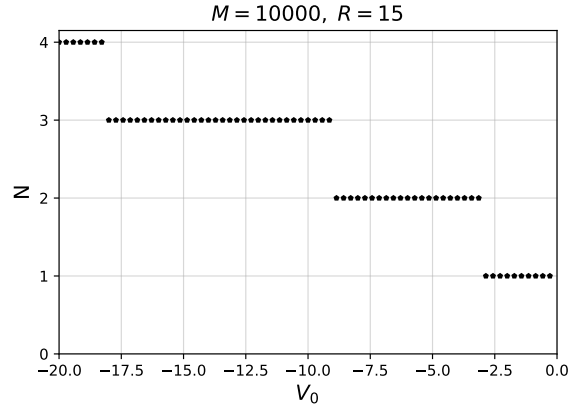


Рис. 1: Количество связанных состояний N в зависимости от константы связи V_0 при размере сетки $M = 10000$ и ширине бокса $R = 15$. Вертикальными линиями отмечены границы, адаптированные из работы [1].

обратимся к работе [1], где рассматривается уравнение, похожее на наше за исключением того, что v_0 в статье соответствует $-V_0/2$ у нас. Если учесть разницу в обозначениях, то можно вынести из данной работы, что одно связанное состояние существует при $0 < |V_0| < 2.684$, два связанных состояния — при $2.684 < |V_0| < 8.650$, три состояния — при $8.650 < |V_0| < 17.796$.

3 Зависимость времени работы программы от размера сетки

Определим, как долго работает программа при различных значениях параметра M — размера сетки. Для определённости фиксируем прочие параметры задачи, например, положим их следующими: $V_0 = -1.0$ и $R = 6$. Результаты продемонстрированы на Рис. 2.

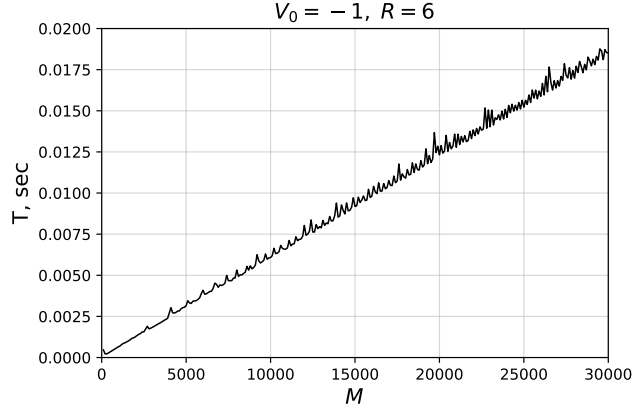


Рис. 2: Время работы программы N в секундах в зависимости от размера сетки M при $V_0 = -1.0$ и $R = 6$.

4 Зависимость ошибки определения уровней энергии от размера сетки и размера бокса

Рассмотрим случай $|V_0| = 1$. Для такого случая вариационный метод даёт оценку $E_1 = -0.335$. В качестве наиболее точного значения энергии основного состояния возьмем значение, получаемое в пределе $M \rightarrow \infty$, для чего аппроксимируем параболлой зависимость уровня энергии от $1/M$. Для $R = 12$ было получено, что наиболее точное значение энергии основного состояния есть $E_1 = -0.3539907385825565$. Такое экстраполированное значение было взято за эталон. На Рис. 3 представлены результаты расчётов.

Рассмотрим случай $|V_0| = 5$, когда имеется два связанных состояния. В качестве наиболее точных значений энергии состояний рассмотрим значения, получаемые экстраполяцией для предела $M \rightarrow \infty$, были взяты $E_1 = -3.140334020243438$, $E_2 = -0.40611998906602725$. На Рис. 4 представлены результаты расчётов.

Список литературы

- [1] Fernández, Francisco. Quantum Gaussian wells and barriers. *Amer. J. Phys.*, 79:752–754, 2011.

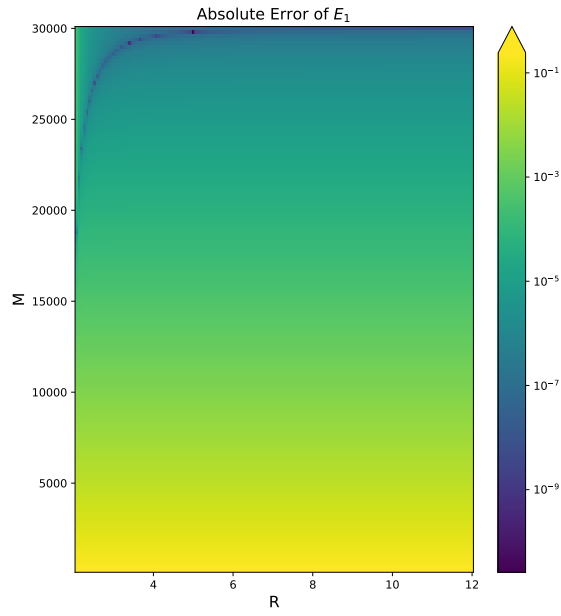


Рис. 3: Абсолютная ошибка вычисления энергии основного состояния при различных размерах сетки M и бокса R для случая $|V_0| = 1$.

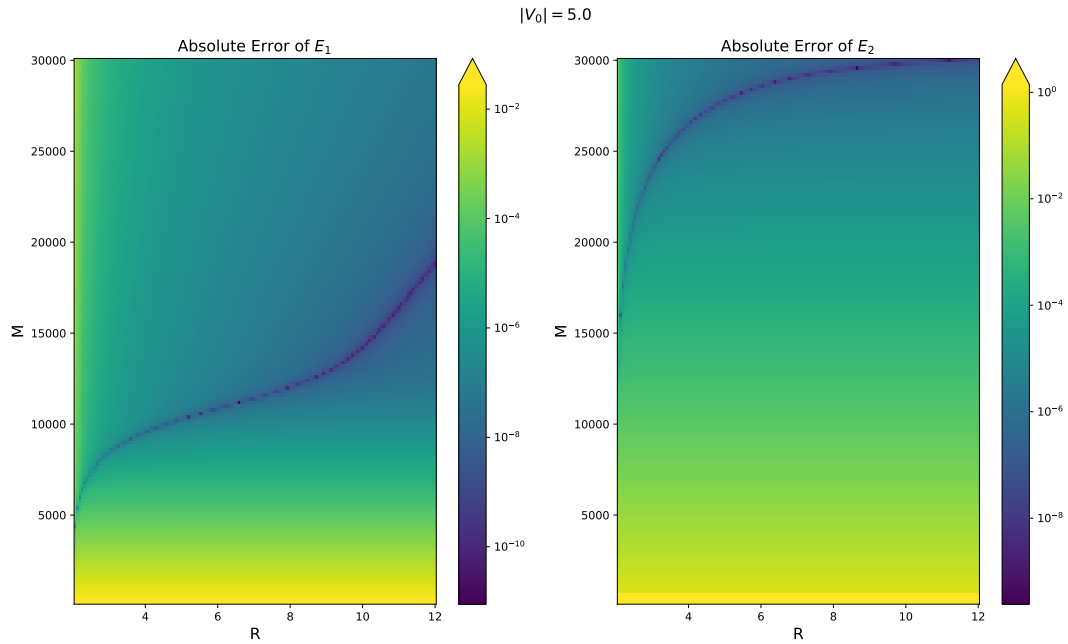


Рис. 4: Абсолютные ошибки вычисления энергий дискретного спектра при различных размерах сетки M и бокса R для случая $|V_0| = 5$.