Домашнее задание №4. Метод подбора постоянной связи

Александр Козлов

17 октября 2022 г.

Формулировка задания

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

$$H = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V_0\, e^{-x^2}, \tag{1}$$

где $V_0 < 0$. Требуется с помощью метода подгонки константы связи:

1. найти основное состояние;

2*. найти возбужденные состояния.

1 Дискретизация задачи

Рассматриваемое уравнение Шрёдингера (УШ) имеет вид

$$-\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V_0\, e^{-x^2}\,\psi = E\,\psi \tag{2}$$

или

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

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

Прежде всего зададим равномерную сетку

$$x_0 = -R,\ x_1 = x_0 + \delta,\ x_2 = x_0 + 2\delta,\ \ldots,\ x_k = x_0 + k\delta,\ \ldots,\ x_M = x_0 + M\delta = R \tag{4}$$

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

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

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

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

Для $k = M - 1$ получаем аналогичное уравнение

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

А для всех остальных k имеем уравнение

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

В матричном виде задача записывается так:

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

2 Метод подбора постоянной связи

Задачу требуется решить методом побора постоянной связи. Рассмотрим главные идеи такого метода. Во-первых, введём *резольвенту* для дискретизованного оператора кинетической энергии $\hat{T}$ (шляпки над символами означают дискретизованный оператор)

$$\hat{R}(z) = \left(\hat{T} - z\hat{I}\right)^{-1}, \tag{10}$$

где z — любое число. Тогда нетрудно показать, что задача на отыскание спектра гамильтониана эквивалентна задаче на отыскание таких величин z, при которых собственные числа $\lambda(z)$ задачи

$$-\hat{R}(z)\,\hat{V}\phi = \lambda(z)\phi \tag{11}$$

равны 1, при этом найденные величины z и составят искомый спектр энергий E.

3 Метод простой итерации для нахождения основного состояния

Введём обозначение $\hat{\mathcal{L}}(z) = -\hat{R}(z)\,\hat{V}$. Собственные значения оператора $\hat{\mathcal{L}}(z)$ дают семейство ветвей $\lambda_k(z)$. Чтобы найти спектр гамильтониана нужно решить уравнения $\lambda_k(z) = 1$ для каждого k, спектр составят найденные корни.

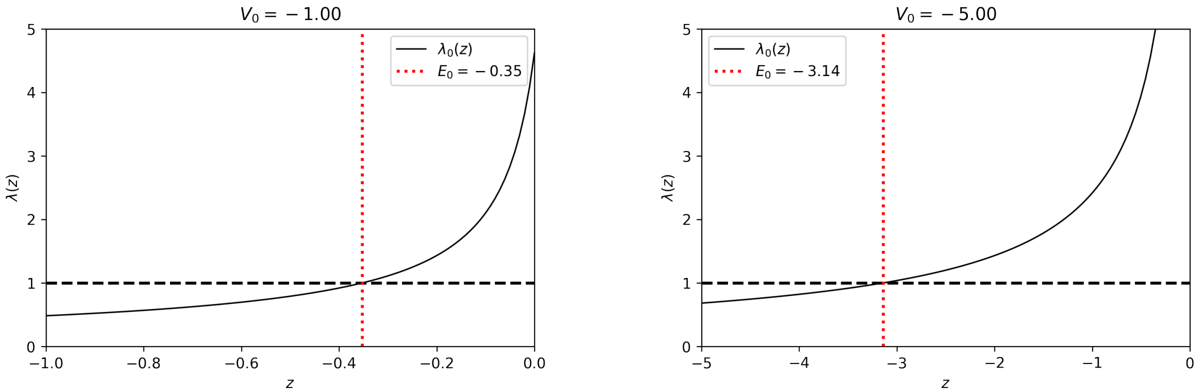
Для нахождения основного состояния можно воспользоваться методом простой итерации, так как основному состоянию отвечает верхняя ветка $\lambda_0(z)$. То есть идея проста. Находим для какого-то набора значений $z_i \in (V_0,\ 0.0)$ наибольшие по абсолютной величине собственные значения операторов $\hat{\mathcal{L}}(z_i)$ $\lambda_0(z_i)$ методом простой итерации, интерполируем значения $\lambda_0(z_i)$ кубическими сплайнами и решаем уравнение $\lambda_0(z) = 1$.

Такой подход позволяет получить достаточно точно величины энергий основных состояний. На Рис. 1a и на Рис. 1b показаны получившиеся ветки $\lambda_0(z)$ для $V_0 = -1.0$ и $V_0 = -5.0$ соответсвенно.

4 Метод итераций Арнольди для отыскания основных и возбужденных состояний

Для отыскания большего числа ветвей можно применить метод итераций Арнольди, который основан на том, чтобы использовать подпространство Крылова

$$K_n(z_i) = \left[\phi_0,\ \hat{\mathcal{L}}(z_i)\phi_0,\ \ldots,\ \hat{\mathcal{L}}^{n-1}(z_i)\phi_0\right],$$

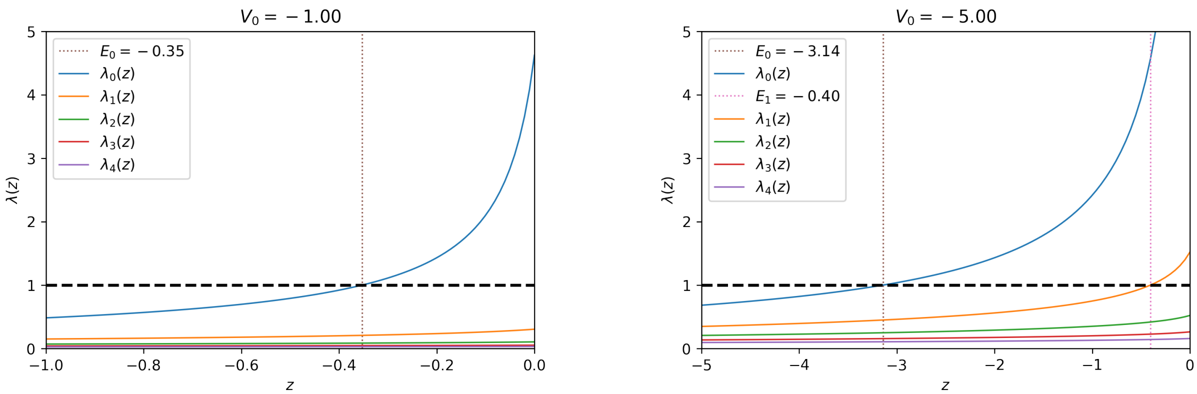


(a) Верхняя ветвь $\lambda_0(z)$ при $M = 1000$ и $R = 6.0$ для случая $|V_0| = 1$. Вертикальной линией отмечено получившееся решение.

(b) Верхняя ветвь $\lambda_0(z)$ при $M = 1000$ и $R = 6.0$ для случая $|V_0| = 5$. Вертикальной линией отмечено получившееся решение.

получающееся в результате использования метода простой итерации с начальной волвой функцией ϕ_0, для постоения в нём ортогонального базиса, которое и даст первые n собственных значений опертора $\hat{\mathcal{L}}(z_i)$.

На Рис. 2a и на Рис. 2b показаны получившиеся ветки первые пять ветвей $\{\lambda_k(z)\}_{k=0}^{4}$ для $V_0 = -1.0$ и $V_0 = -5.0$ соответсвенно.



(a) Первые пять ветвей $\{\lambda_k(z)\}_{k=0}^{4}$ при $M = 1000$ и $R = 6.0$ для случая $|V_0| = 1$. Вертикальными линиями отмечены получившиеся решения.

(b) Первые пять ветвей $\{\lambda_k(z)\}_{k=0}^{4}$ при $M = 1000$ и $R = 6.0$ для случая $|V_0| = 5$. Вертикальными линиями отмечены получившиеся решения.