

# Домашнее задание №4. Метод подбора постоянной связи

Александр Козлов

18 декабря 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 с помощью метода подгонки константы связи:

1. найти основное состояние;
- 2\*. найти возбужденные состояния.

## 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

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

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:

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

## 2 Метод подбора постоянной связи

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

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

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

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

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

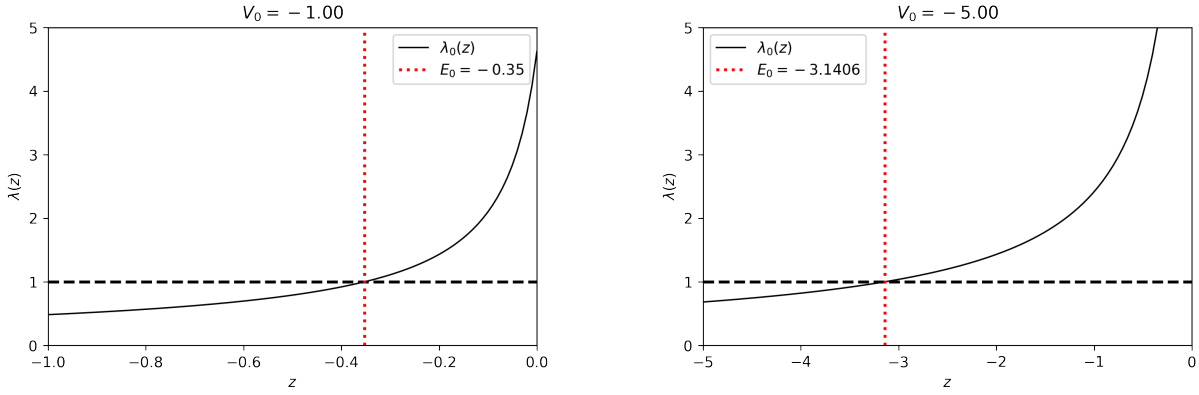
## 3 Метод простой итерации для нахождения основного состояния

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 (итерации продолжаютс до тех пор, пока невязка перестанет быть больше  $10^{-4}$ ), 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. 1а и на Рис. 1б показаны получившиеся ветки  $\lambda_0(z)$  для  $V_0 = -1.0$  и  $V_0 = -5.0$  соответственно.

Кроме того, была исследована зависимость времени нахождения основного состояния методом простых итераций (когда итерации длятся до тех пор, пока невязка не будет меньше или равна  $10^{-4}$ ) от числа точек сетки  $M$ . На Рис. 2 показана данная зависимость для случая  $|V_0| = 5$ . Зависимость времени расчета от числа точек сетки получилась  $O(M^2)$  из-за того, что сложность действия матрицы формы  $n \times m$  на вектор длины  $m$  составляет  $O(nm)$ , у нас была матрица размера  $(M-1) \times (M-1)$ , а вектор имел длину  $M-1$ , поэтому и получилась сложность  $O(M^2)$ .



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

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

Рис. 1

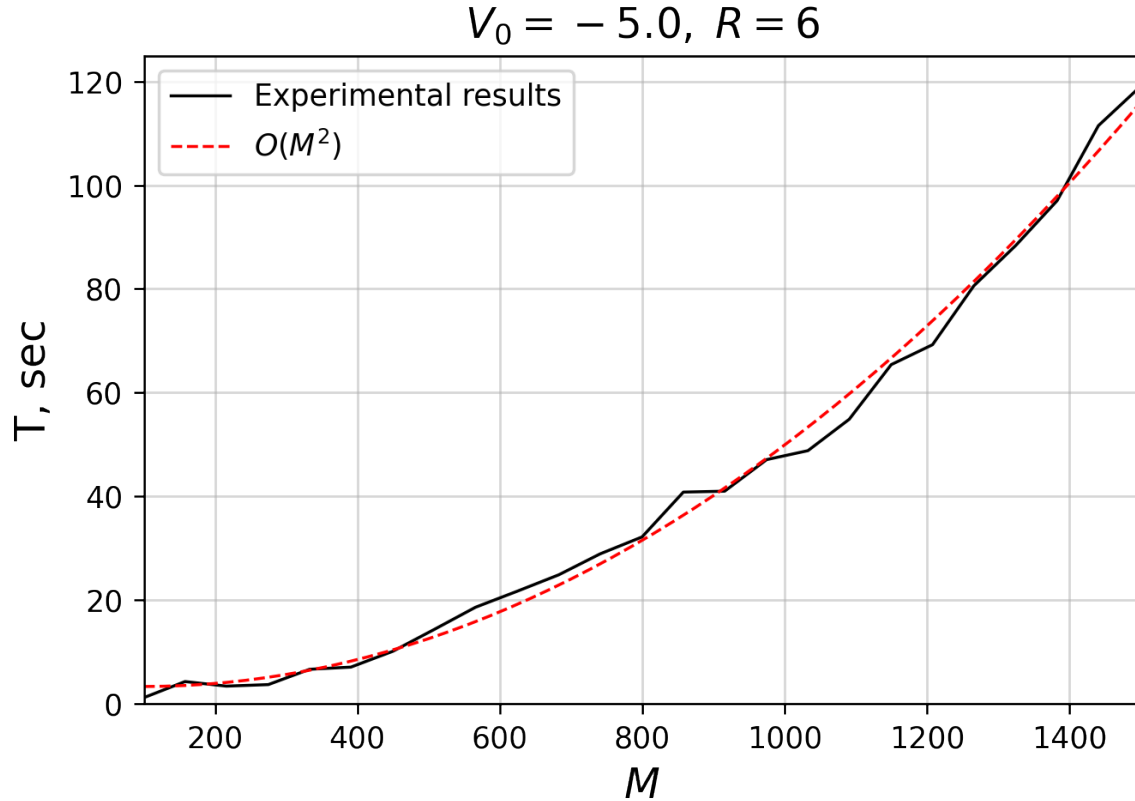


Рис. 2: Чёрным отмечена зависимость времени расчётов методом простой итерации основного состояния от  $M$  при  $R = 6.0$  для случая  $|V_0| = 5$ . Пунктиром показана аппроксимация получившейся зависимости параболой.

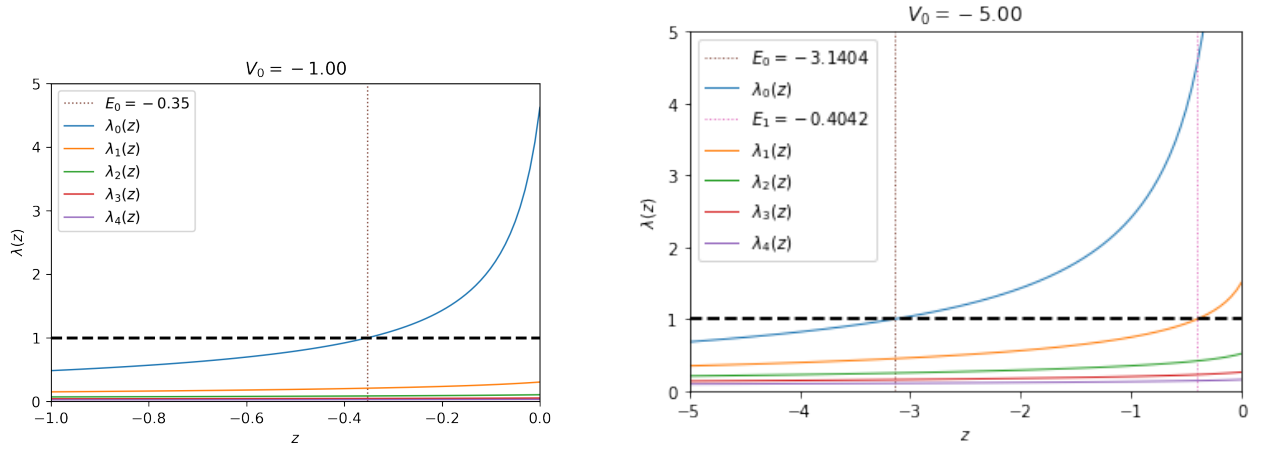
## 4 Метод итераций Арнольди для отыскания основных и возбужденных состояний

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

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

получающееся в результате использования метода простой итерации с начальной волновой функцией  $\phi_0$ , для построения в нём ортогонального базиса, которое и даст первые  $n$  собственных значений оператора  $\hat{\mathcal{L}}(z_i)$ .

На Рис. 3а и на Рис. 3б показаны первые пять получившихся ветвей  $\{\lambda_k(z)\}_{k=0}^4$  для  $V_0 = -1.0$  и  $V_0 = -5.0$  соответственно.



(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.

Рис. 3

Кроме того, была исследована зависимость времени нахождения основного состояния методом итераций Арнольди (искались первые 100 собственных значений) от числа точек сетки  $M$ . На Рис. 4 показана данная зависимость для случая  $|V_0| = 5$ .

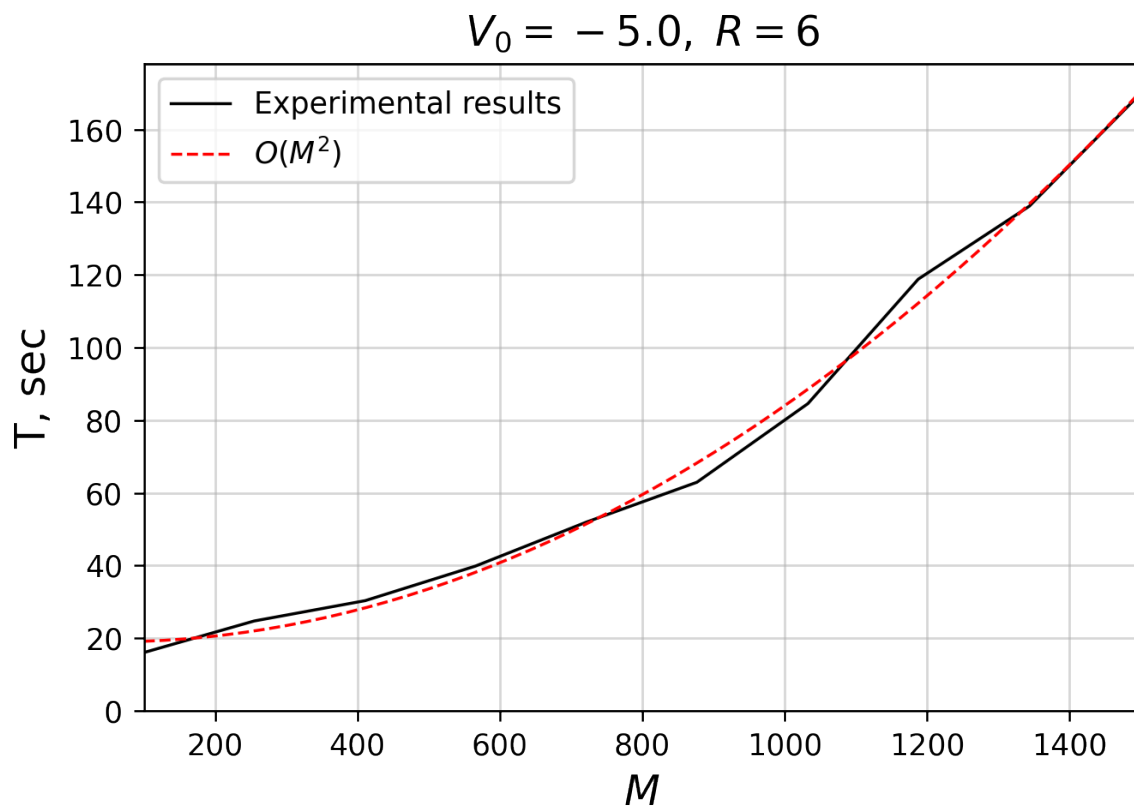


Рис. 4: Чёрным отмечена зависимость времени расчётов методом итераций Арнольди от  $M$  при  $R = 6.0$  для случая  $|V_0| = 5$ . Пунктиром показана аппроксимация получившейся зависимости параболой.