Домашнее задание №1. Диагонализация гамильтониана

Александр Козлов

17 декабря 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 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

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

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:

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

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

2 Количество связанных состояний в зависимости от константы связи

При размере сетки $M = 10\,000$ и ширине бокса $R = 15$ была получена зависимость числа связанных состояний от параметра связи, показанная на Рис. 1. Для оценки правильности полученных результатов

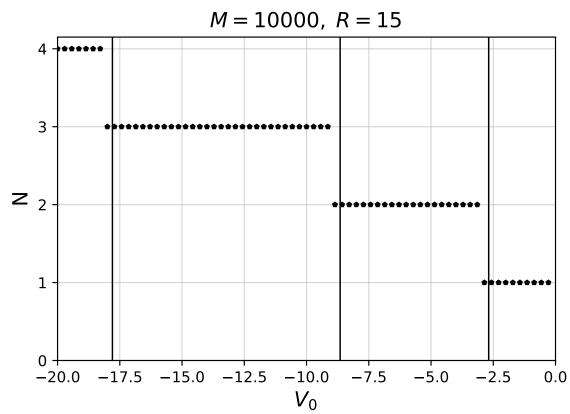

Рис. 1: Количество связанных состояний N в зависимости от константы связи V_0 при размере сетки $M = 10\,000$ и ширине бокса $R = 15$. Вертикальными линиями отмечены границы, адаптированные из работы [1].

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 $8.650 < |V_0| < 17.796$. Видно, что значения константы связи, при которых происходят скачки числа связанных состояний, примерно совпадают.

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.

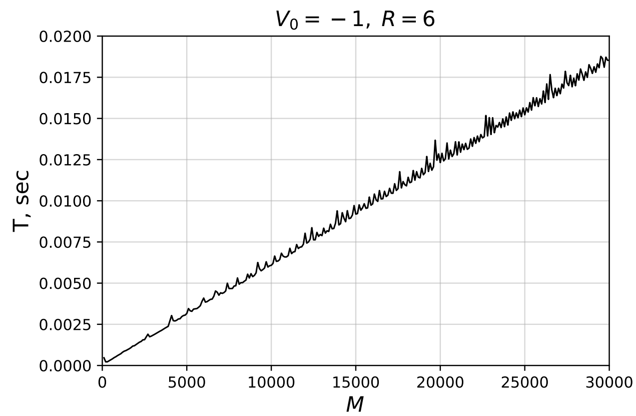

Рис. 2: Время работы программы в секундах в зависимости от размера сетки M при $V_0 = -1.0$ и $R = 6$.

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 при данном R возьмем значение, получаемое в пределе $M \to \infty$, для чего аппроксимируем параболой зависимость уровня энергии от $1/M$ для каждого значения R. На Рис. 4 представлены результаты расчётов.

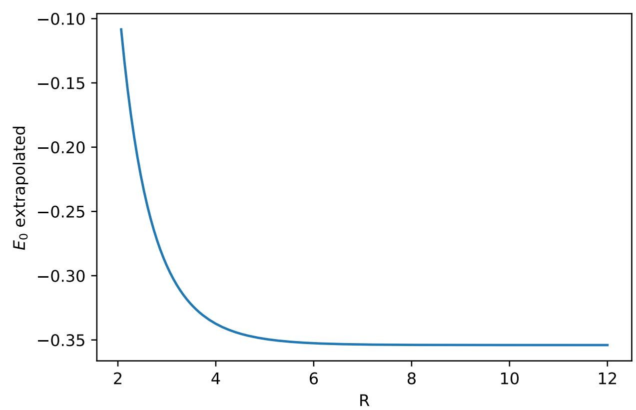

Рис. 3: Экстраполированные значения энергий дискретного спектра при различных размерах бокса R для случая $|V_0| = 1$.

Рассмотрим случай $|V_0| = 5$, когда имеется два связанных состояния. В качестве наиболее точных значений энергии состояний рассмотрим значения, получаемые экстраполяцией для предела $M \to \infty$, были взяты $E_1 = -3.140334020243438$, $E_2 = -0.40611998906602725$. На Рис. 6 представлены результаты расчётов.

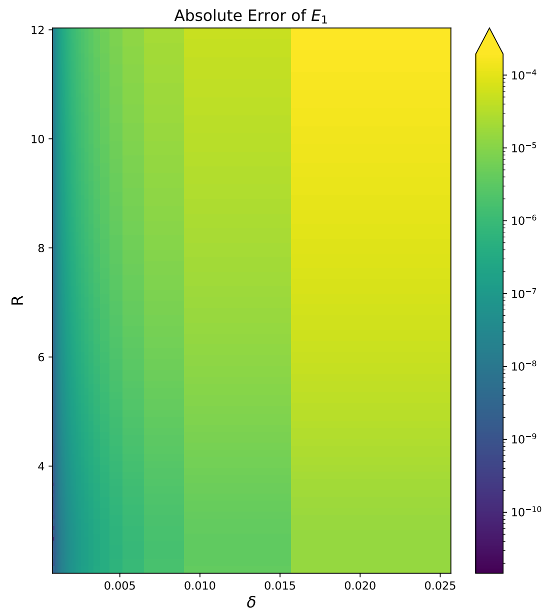

Рис. 4: Абсолютные ошибки вычисления энергий дискретного спектра при различных размерах сетки δ и бокса R для случая $|V_0| = 1$.

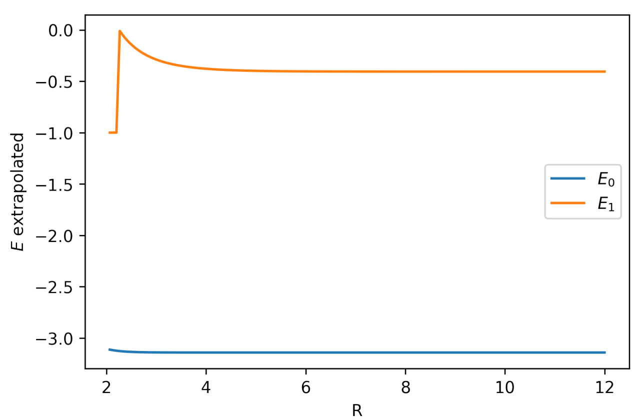

Рис. 5: Экстраполированные значения энергий дискретного спектра при различных размерах бокса R для случая $|V_0| = 5$.

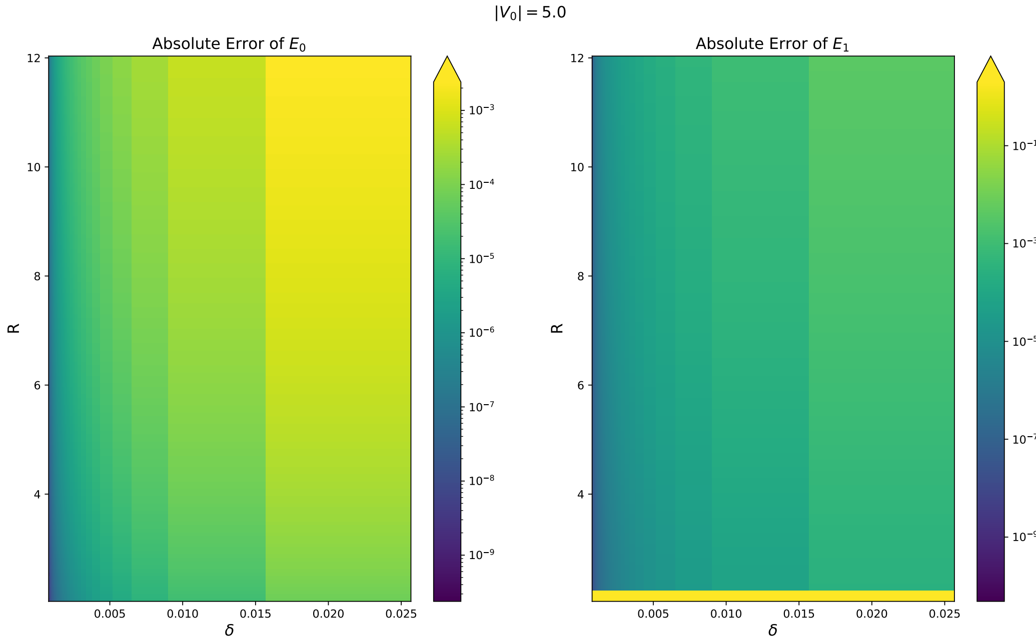

Рис. 6: Абсолютные ошибки вычисления энергий дискретного спектра при различных размерах сетки δ и бокса R для случая $|V_0| = 5$.

Список литературы

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