

# 1 Анализ простейшего случая уравнения Шредингера для частицы в потенциальной Гауссовой яме.

## 1.1 Постановка задачи

В качестве модели задачи исследовалась частица в потенциале гауссовой формы. Гамильтониан системы, и стационарное уравнение Шредингера выглядят следующим образом:

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V_0 \exp(-x^2); \quad H\Psi = E\Psi$$

Поставленные задачи:

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

## 1.2 Константа связи

Число узлов сетки: 10000; Полуширина бокса: 15.

Теоретическое значение количества связанных состояний считалось по формуле  $N = \frac{2\sqrt{V_0}}{\sqrt{2\pi}}$  [1]. Вычисленное количество связанных состояний оценивалось как количество собственных чисел матрицы конечно-разностного приближения гамильтониана системы. Собственные значения вычислялись при помощи метода `eigh_tridiagonal()` пакета `scipy.linalg`.

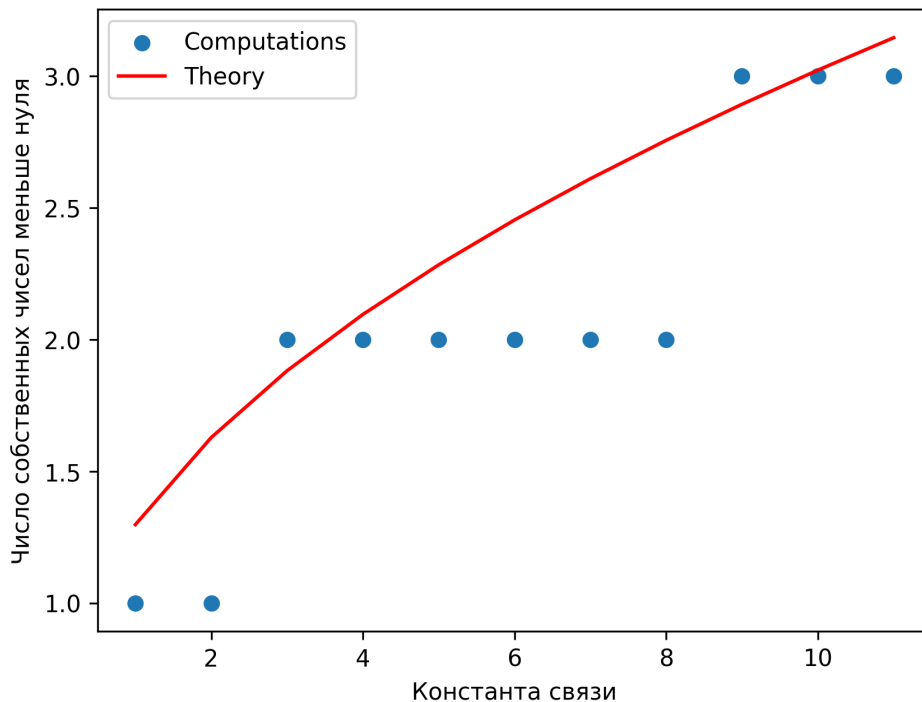


Рис. 1: Зависимость числа связанных состояний системы от модуля константы связи  $V_0$

## 1.3 Вычислительные затраты от размера сетки

Константа связи: 1; Полуширина бокса: 20.

Измерение времени при помощи модуля `time`.

Так как использовался метод, работающий с трехдиагональными матрицами, то итоговая зависимость от размера сетки — линейная.

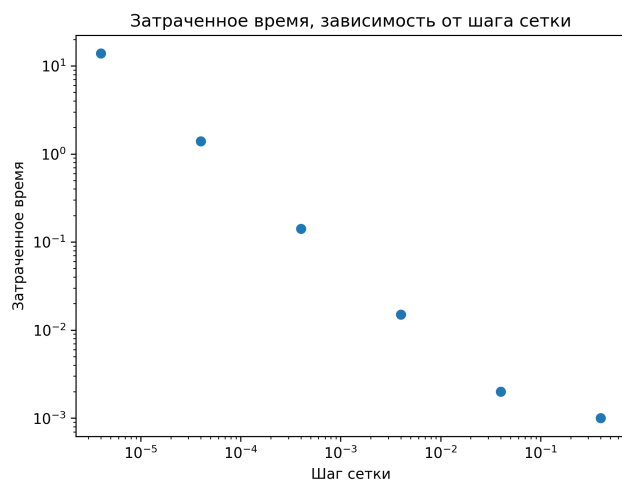
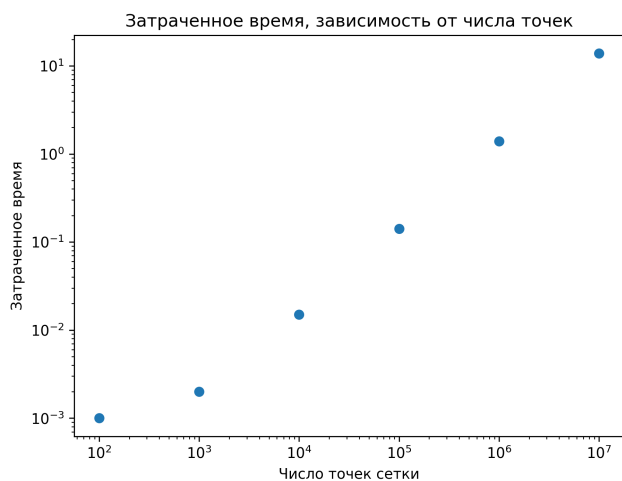


Рис. 2: Временные затраты в зависимости от размера сетки ( $O(N^1)$ )

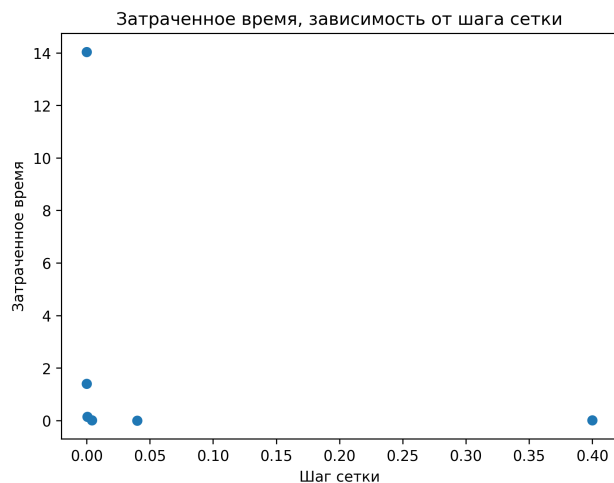
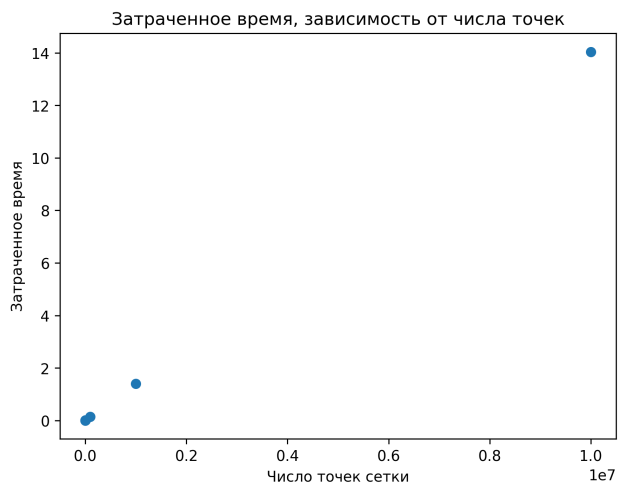


Рис. 3: Временные затраты в зависимости от размера сетки ( $O(N^1)$ )

## 1.4 Оценка погрешности вычислений

Константа связи: 1; Полуширина бокса: 20, Число точек сетки: 10000.

В качестве точного значения энергии было взято значение, вычисленное при полуширине бокса в 20 и  $10^8$  точек сетки. Ниже представлены графики зависимости погрешности вычисления величины энергии.

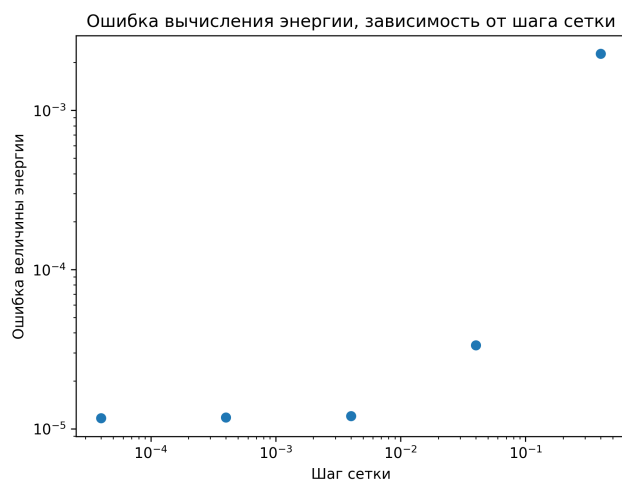
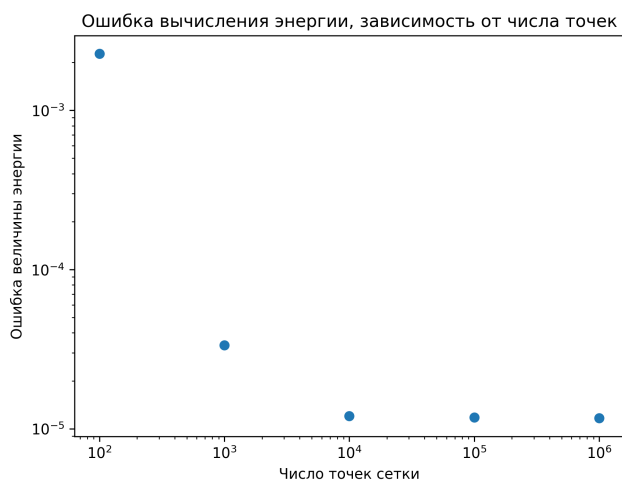


Рис. 4: Погрешность вычисления энергии в зависимости от числа точек

Рост погрешности при увеличении размера бокса, можно объяснить тем, что потенциал будет хуже воспроизводиться на боксах большого размера.

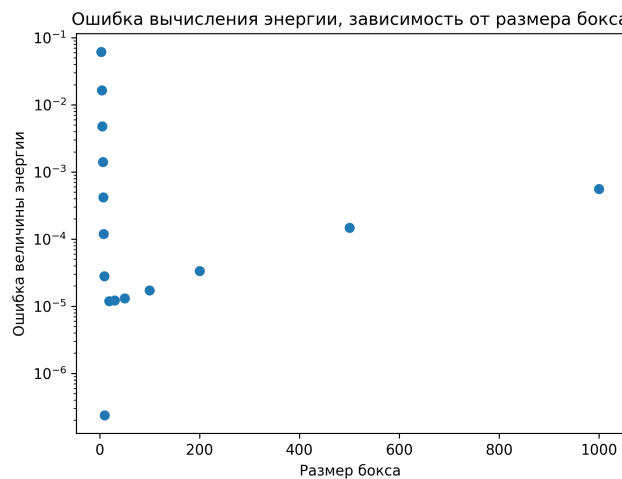
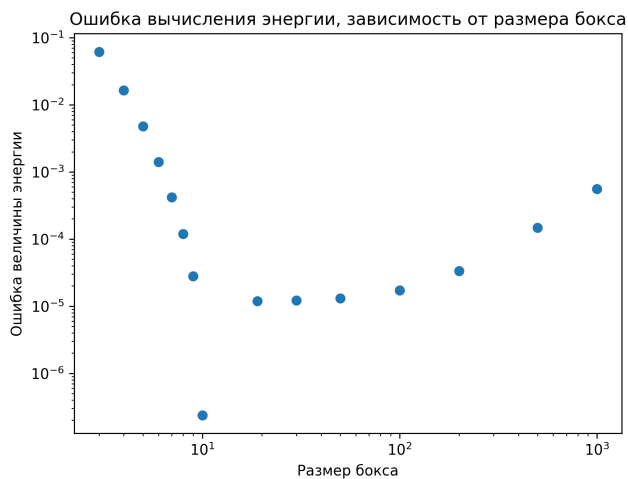


Рис. 5: Погрешность вычисления энергии в зависимости от размера бокса

## Список литературы

- [1] Saikat Nandi. The quantum gaussian well. *American Journal of Physics*, 78(12):1341–1345, dec 2010.