

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

## 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 (Повтор Задачи 1, но методом ортогональных коллокаций):

- 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 Коллокации

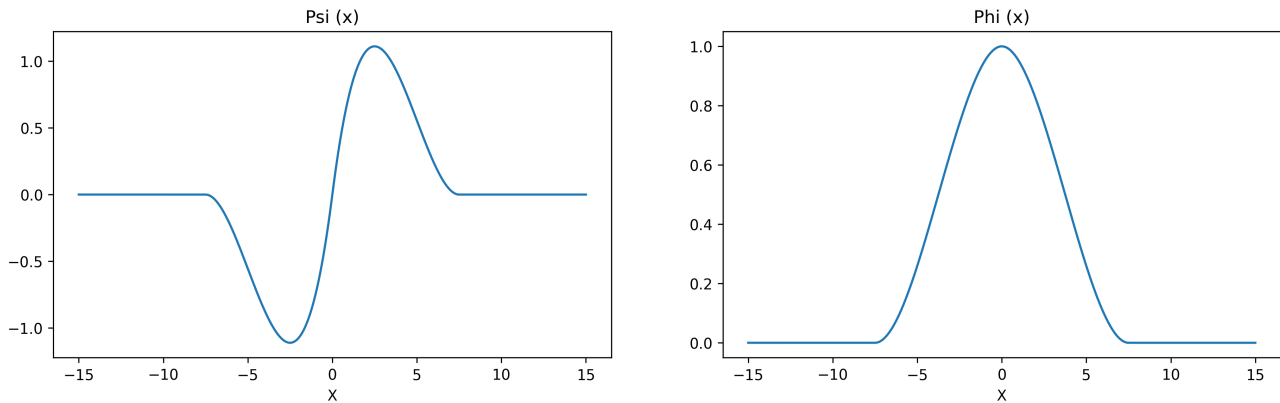


Рис. 1: Пример функций  $\Psi(x)$  и  $\Phi(x)$

## 1.3 Константа связи

Число узлов сетки: 300; 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 `eigvals()` пакета `scipy.linalg`.

## 1.4 Вычислительные затраты от размера сетки

Константа связи: 1; Полуширина бокса: 20.

Измерение времени при помощи модуля `time`.

## 1.5 Оценка погрешности вычислений

Константа связи: 1; Полуширина бокса: 20, Число точек сетки: 300.

В качестве точного значения энергии было взято значение, вычисленное при полуширине бокса в 20 и  $10^8$  точек сетки из Задания 1. Ниже представлены графики зависимости погрешности вычисления величины энергии.

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

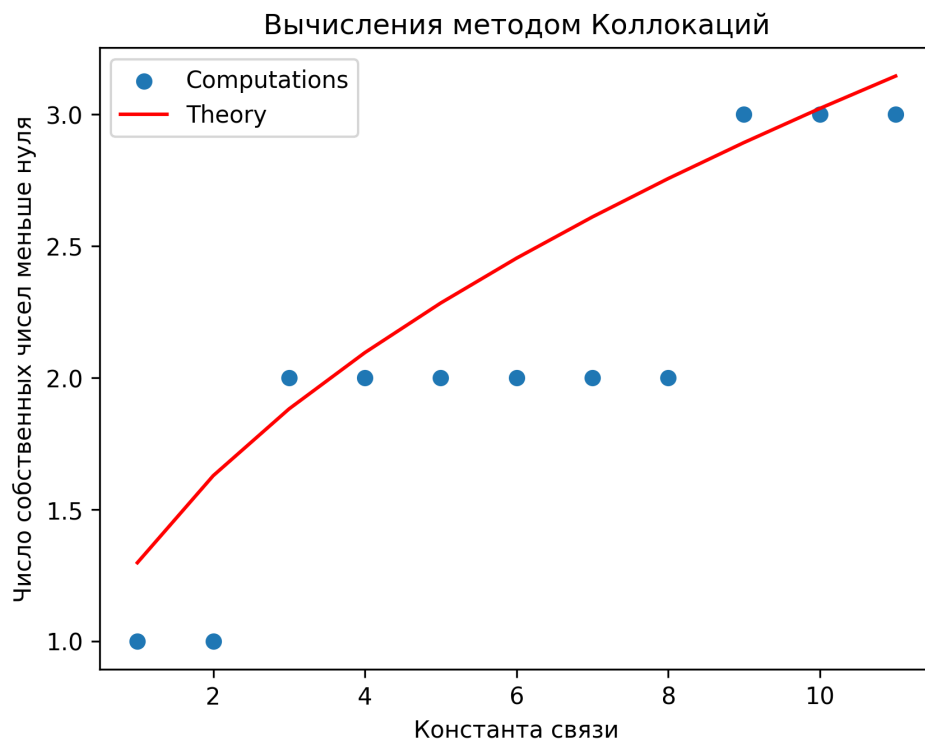


Рис. 2: Зависимость числа связанных состояний системы от модуля константы связи  $V_0$

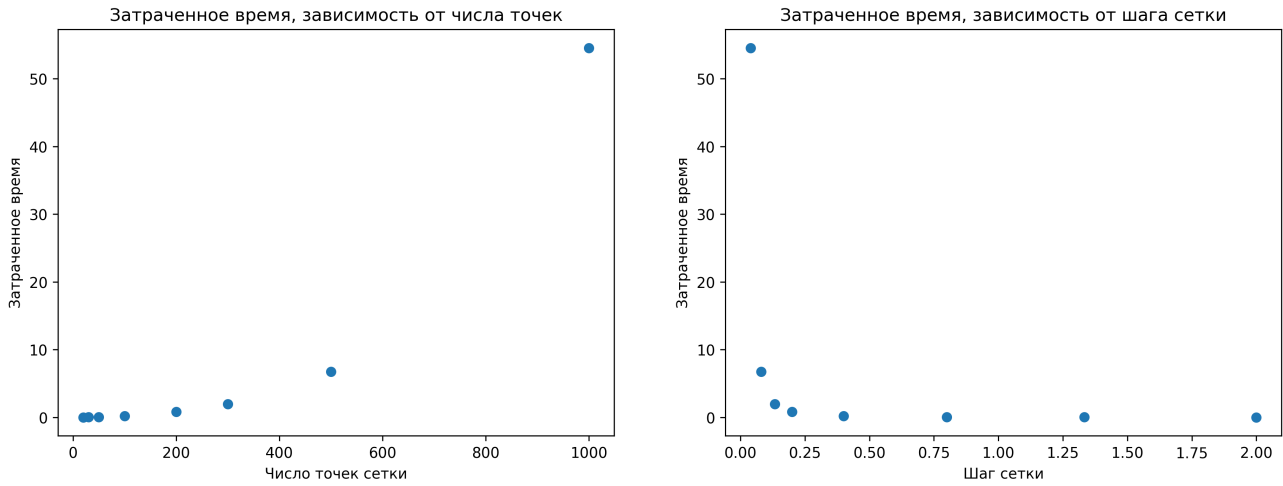


Рис. 3: Временные затраты в зависимости от размера сетки ( $O(N^{2.4})$ )

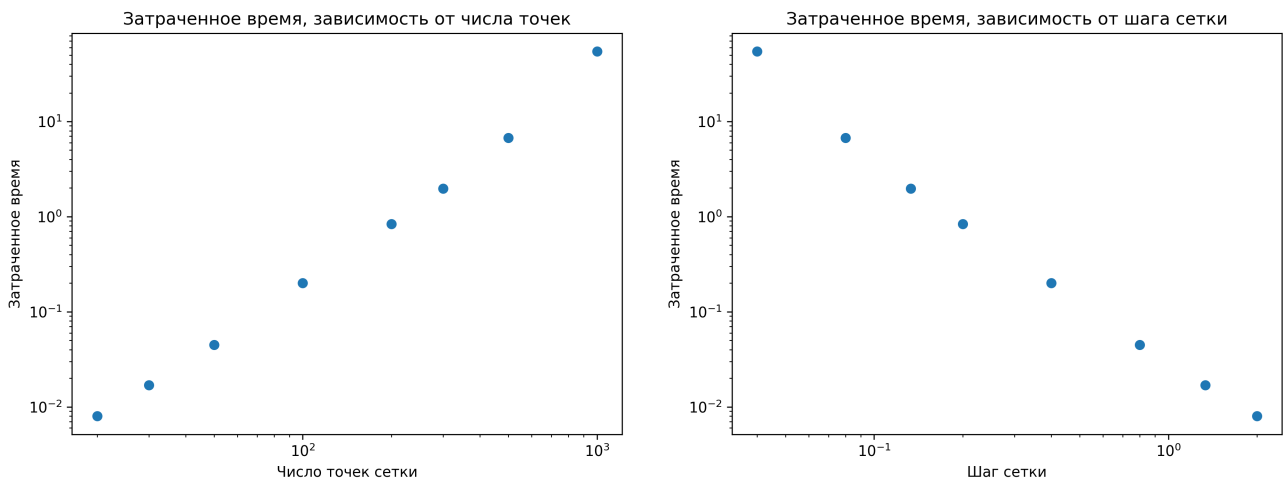


Рис. 4: Временные затраты в зависимости от размера сетки ( $O(N^{2.4})$ )

## Список литературы

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

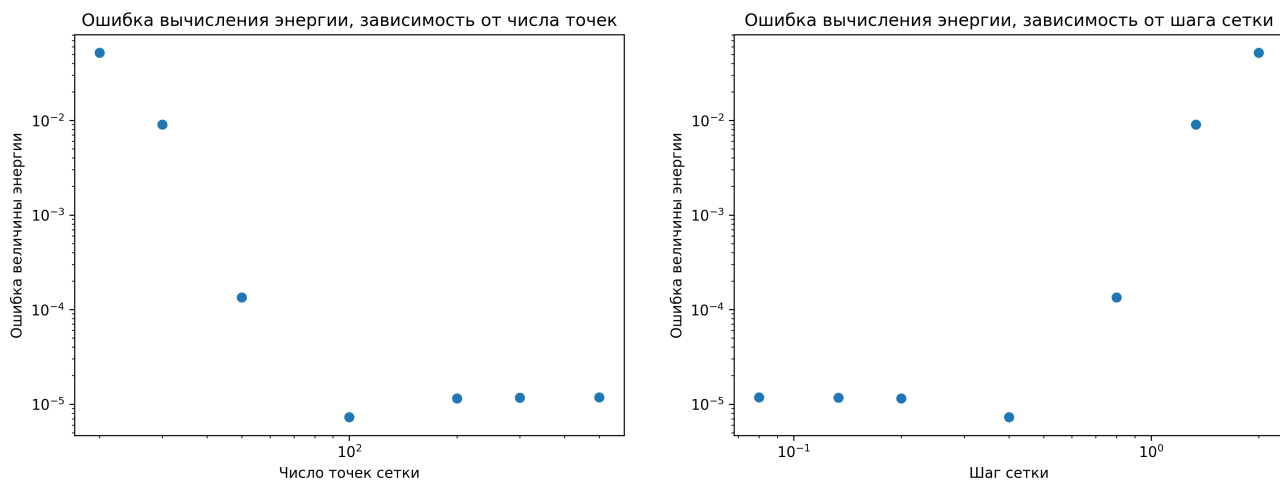


Рис. 5: Погрешность вычисления энергии в зависимости от числа точек

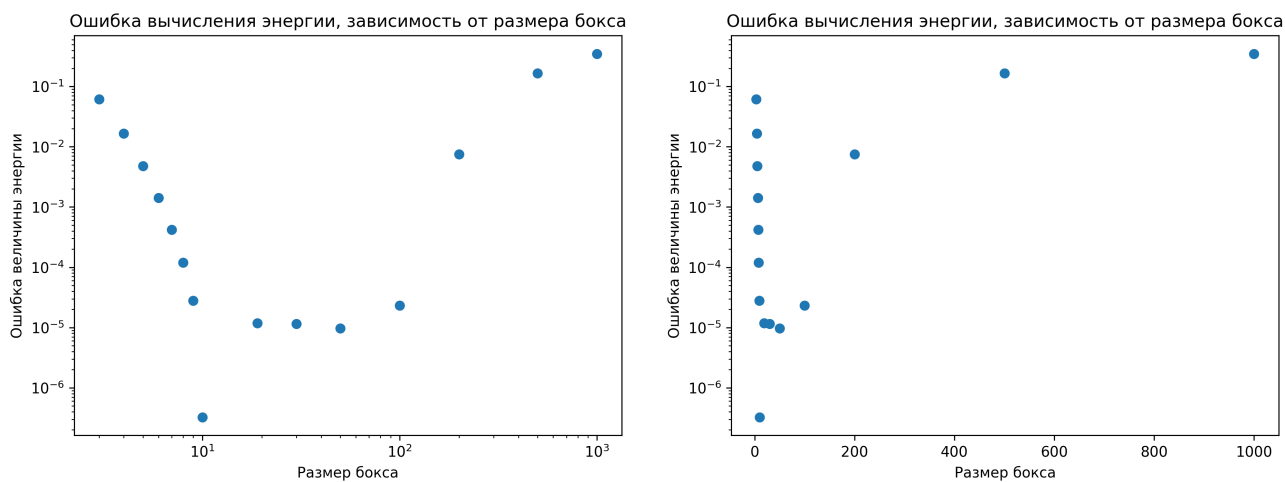


Рис. 6: Погрешность вычисления энергии в зависимости от размера бокса