1 Вычисление основного состояния системы при помощи метода подгонки константы связи

1.1 Постановка задачи

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

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

Поставленные задачи:

- Найти энергию основного состояния, методом подгонки константы связи

1.2 Оценка энергии

Константа связи: 5; Полуширина бокса: 10; Число узов сетки: 100.

Опишем кратко метод. Разделим гамильтониан на часть, для которой легко вычислить резольвенту и остаток, в нашем случае на оператор кинетической и потенциальной энергии, и введем резольвенту R:

$$H = H_0 + V; \qquad R(z) = (H_0 - z * I)^{-1}$$

Рассмотрим параметричискую систему уравнений

$$\begin{cases} (I + R(z)V)\Psi_z = 0 \\ -R(z)V\Psi_z = \lambda(z)\Psi_z|_{z=E} \end{cases}$$

Когда z становится одним из собственных чисел исходного опретатора, то (z) становится единицей.

Таким образом численную схему решения можно описать следующим образом:

- Составить оператор $R(z) = (H_0 - z * I)^{-1}$
- Решить уравнение $\lambda(E) = 1$, где $\lambda(z)$ - наибольшее по модулю собственное число оператора $-R(z)V$

Для решения уравнения оценивались собственные значения оператора при различных значениях z, методом прямых итераций, затем полученная зависимость интерполировалась (кусочно-линейной функцией), и находилось пересечение с прямой $\lambda = 1$. Графическое представление шагов, изображено на рисунке:

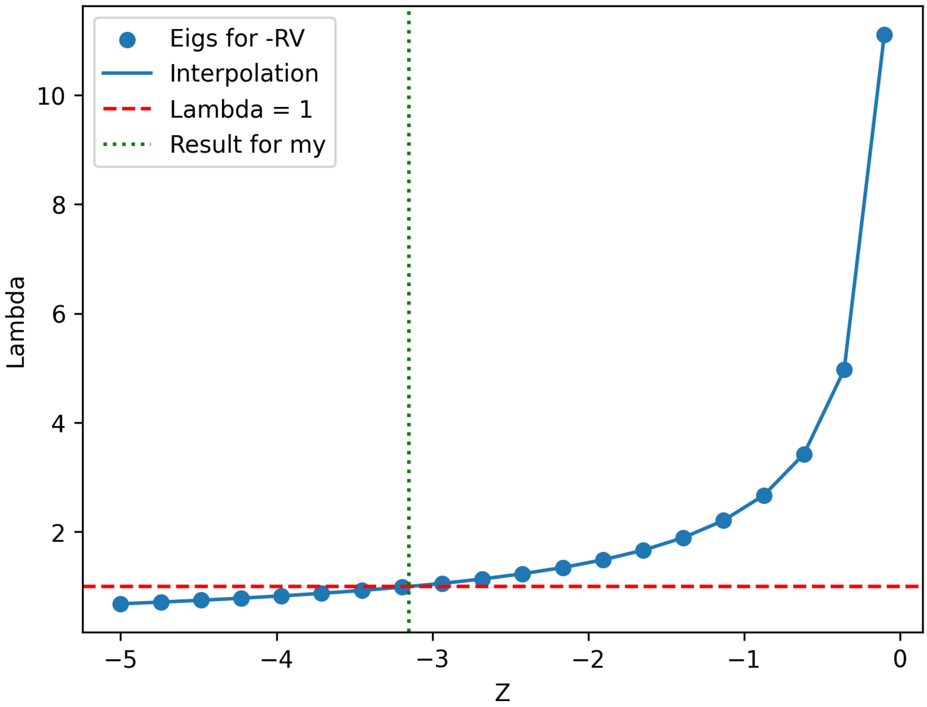

Рис. 1: Решение задачи оценки энергии методом подгонки константы связи