## Базовый матричный метод Нумерова

Метод Нумерова является одним из численных методов решения обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = f(x)\psi(x) \tag{1}$$

Одномерное стационарное уравнение Шредингера является уравнением именно такого типа

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \tag{2}$$

$$\psi^{(2)}(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]\psi(x) = f(x)\psi(x), \tag{3}$$

где

$$\psi^{(n)}(x) = \frac{d^n}{dx^n}\psi(x), \quad f(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left[E - V(x)\right]. \tag{4}$$

Рассмотрим разложение в ряд Тейлора волновой функции $\psi(x)$ в окрестности точки $x$ при приращении $d$

$$\psi(x \pm d) = \psi(x) \pm d\psi^{(1)}(x) + \frac{1}{2!}d^2\psi^{(2)}(x) \pm \frac{1}{3!}d^3\psi^{(3)}(x) + \frac{1}{4!}d^4\psi^{(4)}(x) + \dots. \tag{5}$$

Сумме значений $\psi(x+d)$ и $\psi(x-d)$ будет иметь производные только четного порядка в Тейлоровском разложении, ограничимся разложением вплоть до 6го порядка

$$\psi(x+d) + \psi(x-d) = 2\psi(x) + d^2\psi^{(2)}(x) + \frac{1}{12}d^4\psi^{(4)}(x) + O(d^6). \tag{6}$$

Разрешим последнее соотношение относительно производной второго порядка $\psi^{(2)}(x)$

$$\psi^{(2)}(x) = \frac{\psi(x+d) + \psi(x-d) - 2\psi(x)}{d^2} - \frac{1}{12}d^2\psi^{(4)}(x) + O(d^4). \tag{7}$$

Подействуем оператором дифференцирования второго порядка на уравнение (3) и представим вторую производную в правой части в виде конечной разности

$$\psi^{(4)}(x) = \frac{d^2}{dx^2}\left[f(x)\psi(x)\right] = \frac{f(x+d)\psi(x+d) + f(x-d)\psi(x-d) - 2f(x)\psi(x)}{d^2} + O(d^2) \tag{8}$$

Мы получили оценку до второго порядка по $d$ четвертой производной $\psi^{(4)}(x)$, входящей в правую часть уравнения (7), но поскольку производная умножается на $d^2$, то подставив в уравнение (7) соотношение (8) мы сохраним точность до четверго порядка малости по $d$.

$$\psi^{(2)}(x) = \frac{\psi(x+d)+\psi(x-d)-2\psi(x)}{d^2} - \frac{1}{12}\left(f(x+d)\psi(x+d)+\psi(x-d)f(x-d)-\right.$$
$$\left.-2\psi(x)f(x)\right) + O(d^4) \tag{9}$$

Вспомним, что вторая производная $\psi^{(2)}(x)$ равна $f(x)\psi(x)$, получаем соотношение, связывающее значения функций в точках на сетке по $d$.

$$f_i\psi_i = \frac{\psi_{i+1}+\psi_{i-1}-2\psi_i}{d^2} - \frac{1}{12}\left(f_{i+1}\psi_{i+1}+f_{i-1}\psi_{i-1}-2f_i\psi_i\right), \tag{10}$$

где были введены следующие обозначения

$$f_{i-1} \equiv f(x-d), \quad f_i \equiv f(x), \quad f(_{i+1} \equiv f(x+d), \tag{11}$$
$$\psi_{i-1} \equiv \psi(x-d), \quad \psi_i \equiv \psi(x), \quad \psi_{i+1} \equiv \psi(x+d). \tag{12}$$

Переставляя местами слагаемые в (10), получаем

$$\frac{\psi_{i+1}+\psi_{i-1}-2\psi_i}{d^2} = \frac{1}{12}\left(f_{i+1}\psi_{i+1}+f_{i-1}\psi_{i-1}+10f_i\psi_i\right). \tag{13}$$

Вспоминаем, что $f = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V)$, следовательно

$$f_{i-1} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_{i-1}), \quad f_i = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_i), \quad f_{i+1} = -\frac{2m}{\hbar^2}(E-V_{i-1}). \tag{14}$$

Подставляя эти соотношения в (10), имеем

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_{i-1}-2\psi_i+\psi_{i+1}}{d^2} + \frac{V_{i-1}\psi_{i-1}+10V_i\psi_i+V_{i+1}\psi_{i+1}}{12} = E\frac{\psi_{i-1}+10\psi_i+\psi_{i+1}}{12}. \tag{15}$$

Если мы представим $\psi$ в виде вектора-столбца $(\dots,\psi_{i-1},\psi_i,\psi_{i+1},\dots)$, и определим матрицы

$$A = \frac{1}{d^2}\left(\mathbb{I}_{-1}-2\mathbb{I}_0+\mathbb{I}_1\right), \quad B = \frac{1}{12}\left(\mathbb{I}_{-1}+10\mathbb{I}_0+\mathbb{I}_1\right), V = \mathrm{diag}(\dots,V_{i-1},V_i,V_{i+1},\dots), \tag{16}$$

где $\mathbb{I}_p$ – это нулевая матрица за исключением $p$-ой диагонали (если считать от главной), которая заполнена единицами, то уравнение (15) преобразуется в следующее матричное уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m}A\psi + BV\psi = EB\psi. \tag{17}$$

Умножая обе части (17) на $B^{-1}$ слева, получаем

$$-\frac{\hbar^2}{2m}B^{-1}A\psi + V\psi = E\psi, \tag{18}$$

то есть, матричное уравнение на собственные значения матрицы $H$

$$H\psi = E\psi, \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m}B^{-1}A + V, \tag{19}$$

где $H$ – матрица гамильтониана системы. Используя оценку второй производной по методу Нумерова, получаем матрицу кинетическую энергию в виде произведения обратной к тридиагональной матрице $B^{-1}$ и тридиагональной матрицы $A$: $T = -\frac{\hbar^2}{2m}B^{-1}A$.