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

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

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

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