



Группа	М32101	К работе допущен	
Студент	Аль Даббагх Харит Мазумдер Шоувик	Работа выполнена	27.05.2021
Преподаватель	Шоев Владислав Иванович	Отчет принят	

Рабочий протокол и отчет по моделированию № 1

Решение независимого от времени уравнения Шредингера методом конечных разностей

Независимое от времени уравнение Шредингера - это линейное дифференциальное уравнение, которое описывает волновую функцию или функцию состояния квантово-механической системы. Решение уравнения Шредингера дает квантованные уровни энергии, а также волновые функции данной квантовой системы. Уравнение Шредингера может быть использовано для моделирования поведения элементарных частиц и атомов. В сочетании с принципом суперпозиции уравнение Шредингера учитывает образование химических связей и, следовательно, может использоваться для моделирования молекулярных систем и периодических систем, таких как кристаллические материалы.

Рассмотрим простое одномерное уравнение Шредингера. Мы покажем, как это уравнение может быть решено с помощью [метода конечных разностей](#).

Уравнение Шредингера для одномерной квантовой системы имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

Мы можем дискретизировать это уравнение с помощью формулы центростремительной разности второго порядка:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}}{d^2} \right) + V_j \psi_j = E\psi_j$$

Где d - размер шага.

Предположим, что мы хотим решить это уравнение в области $x \in [a, b]$, тогда мы можем создать $N + 1$ сеточных точек, таких что $x_0 = a$ и $x_N = b$. Поскольку частица ограничена в этой области, это приводит к следующим граничным условиям:

$$\begin{aligned}\psi_0 &= 0 \\ \psi_N &= 0\end{aligned}$$

Допустим, что $N = 5$, это означает, что нам нужно вычислить ψ_j для $j = 1, 2, 3, 4$. Подставляя последовательно j в последнее уравнение, мы получим следующую линейную систему:

$$-\frac{\hbar^2}{2md^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Алгоритм решения состоит в следующем:

1. Построить матрицу кинетической энергии:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2md^2} \begin{pmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$

2. Построить матрицу потенциальной энергии:

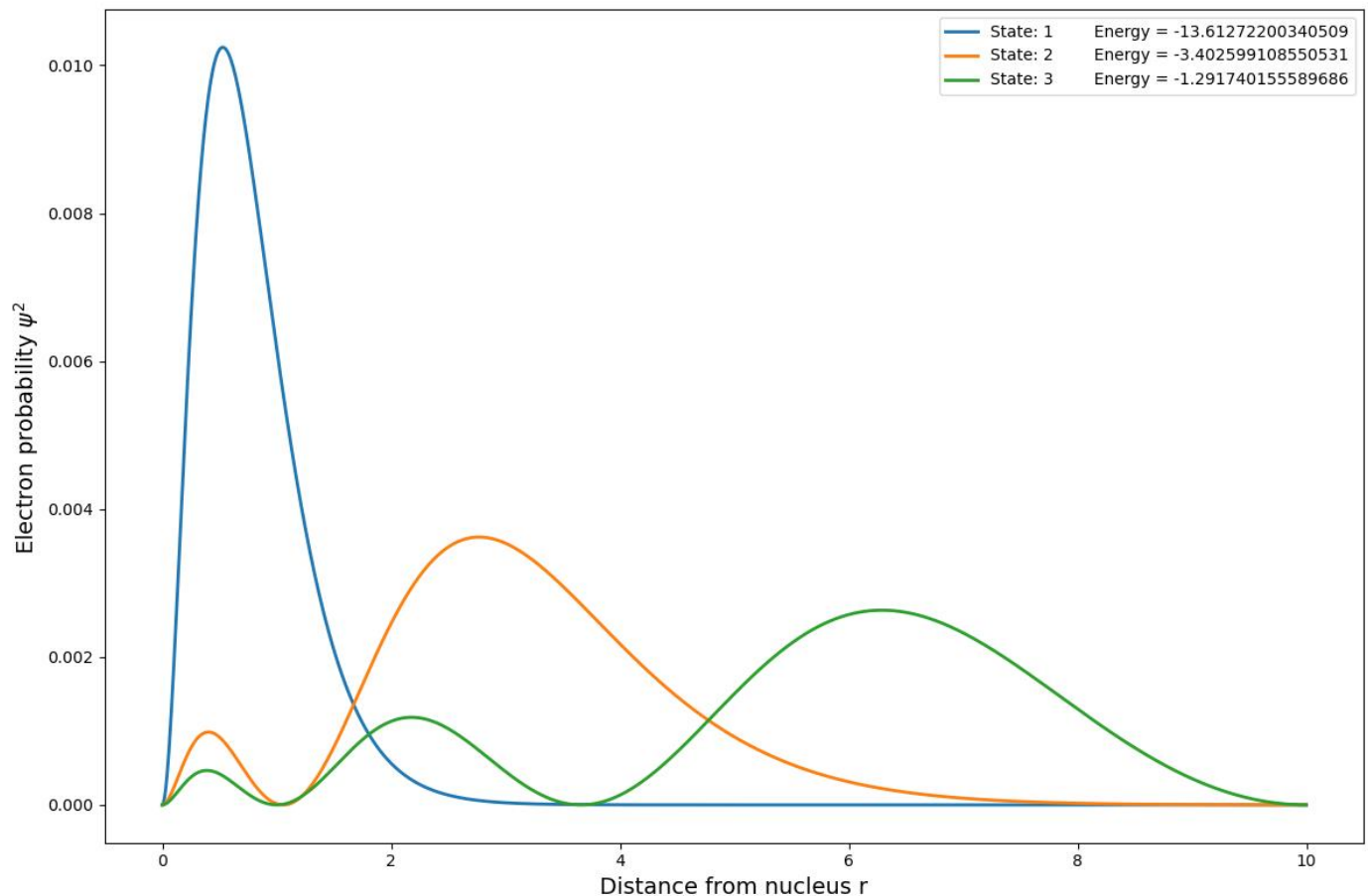
$$V = \begin{pmatrix} V_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & V_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & V_4 \end{pmatrix}$$

3. Построить матрицу гамильтониана:

$$H = T + V$$

4. Диагонализировать матрицу H, чтобы получить собственные значения (энергии) и собственные векторы (волновые функции).

Реализуя алгоритм, мы получаем следующие результаты:



Вывод

Мы видели, что метод конечных разностей является очень полезным для решения уравнений с собственными значениями, таких как уравнение Шредингера. Изменяя потенциальную энергию системы, код может быть применен и к другим фундаментальным одномерным моделям, таким как системы квадратных колодцев и атом водорода.

Полный код можно посмотреть [здесь](#).