Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики
УЧЕБНЫЙ ЦЕНТР ОБЩЕЙ ФИЗИКИ ФТФ

УНИВЕРСИТЕТ ИТМО

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 ∈ [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:

$$\psi_0=0$$
$$\psi_N=0$$

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:

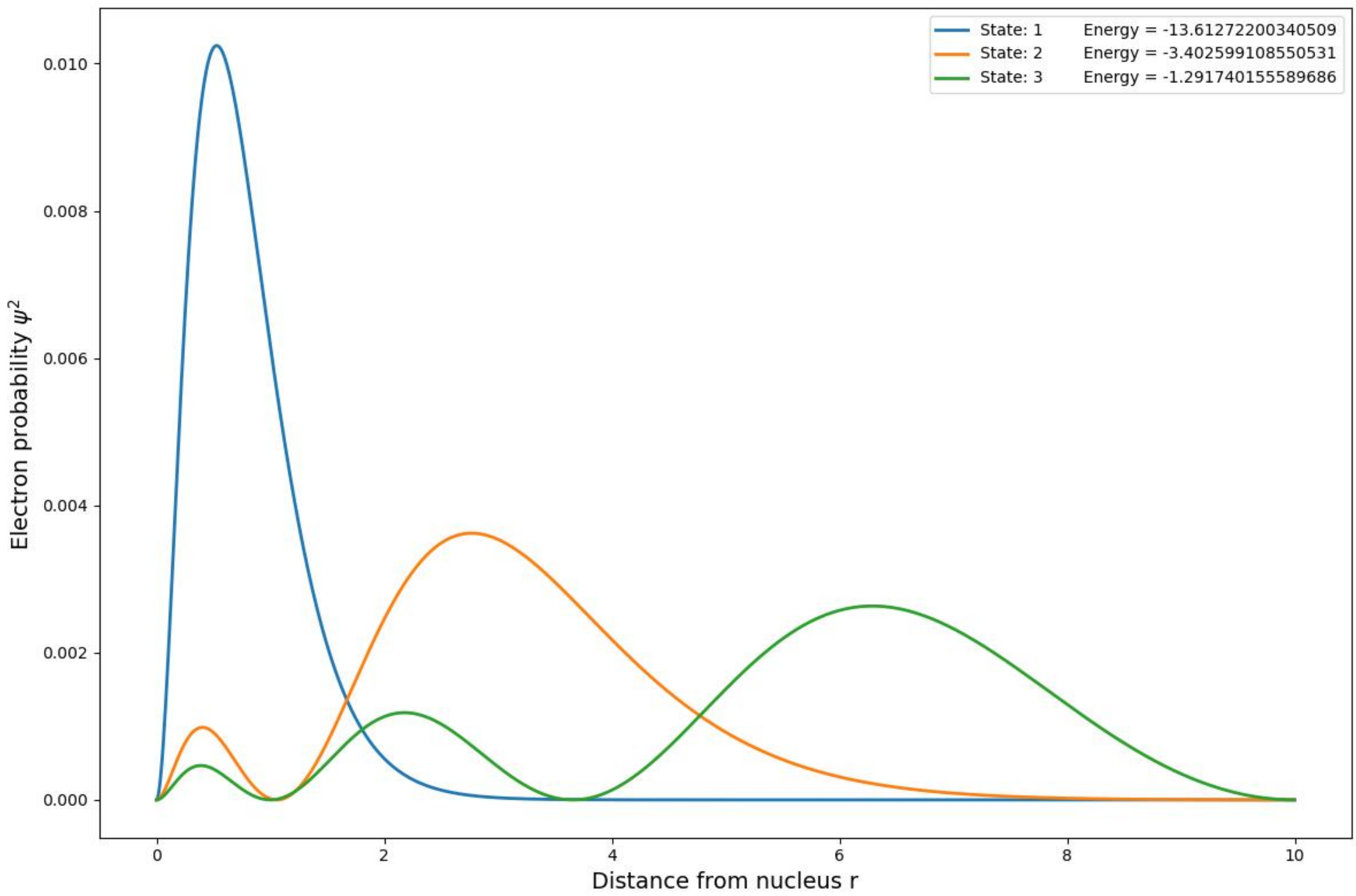
$$V = \begin{pmatrix}V_1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & V_2 & 0 & 0\\ 0 & 0 & V_3 & 0\\ 0 & 0 & 0 & V_4\end{pmatrix}$$

3. Построить матрицу гамильтониана:

$$H = T + V$$

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

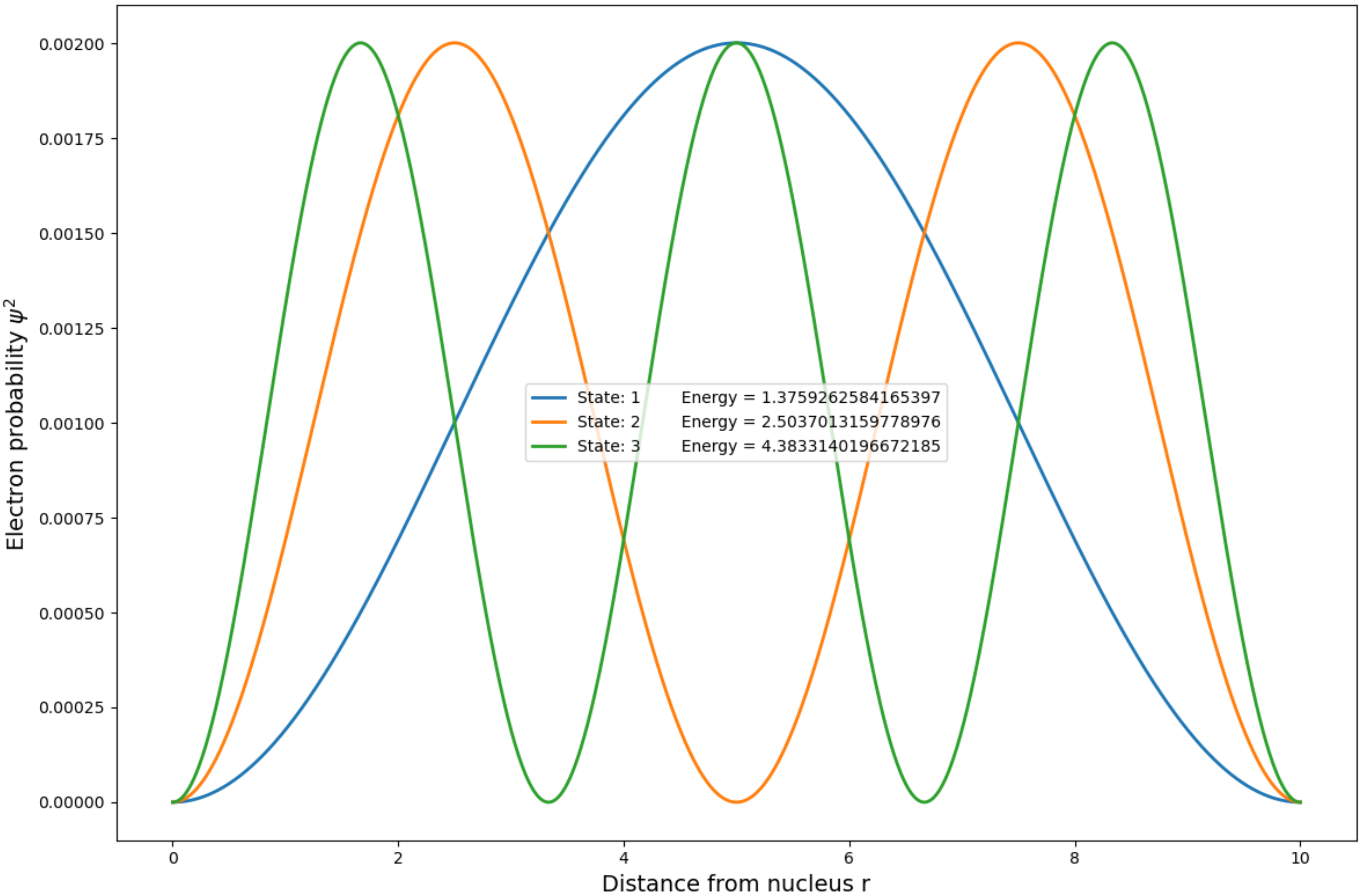
Реализуя алгоритм, мы получаем следующие результаты:



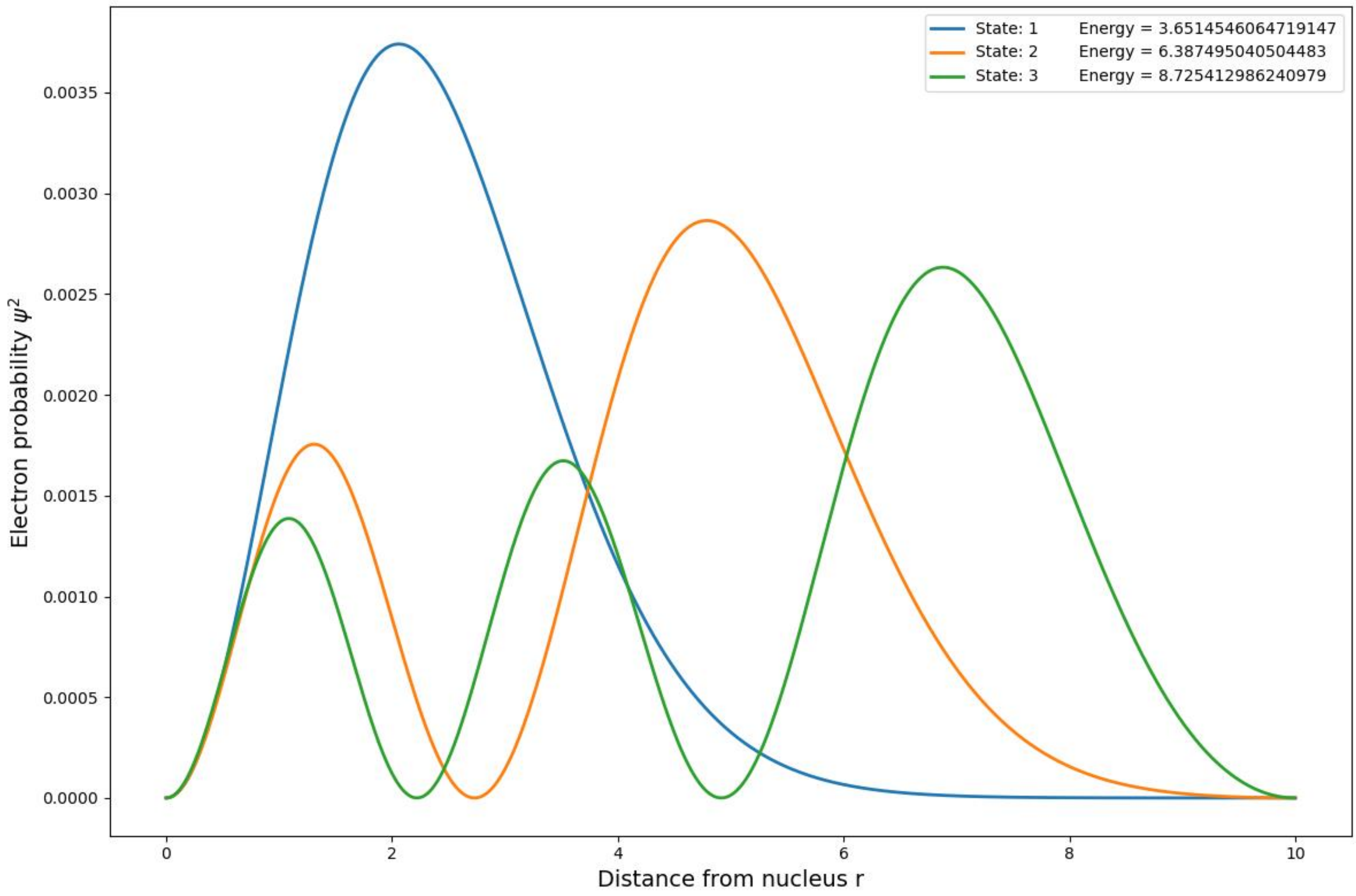
Выводы

Мы видели, что метод конечных разностей является очень полезным для решения уравнений с собственными значениями, таких как уравнение Шредингера. Одним из ограничений метода конечных разностей является работа с криволинейными границами для определения граничных условий. Граничные условия необходимы для усечения вычислительной области. Кроме того, метод ограничен и не так точен, как производная, поэтому график будет не таким точным.

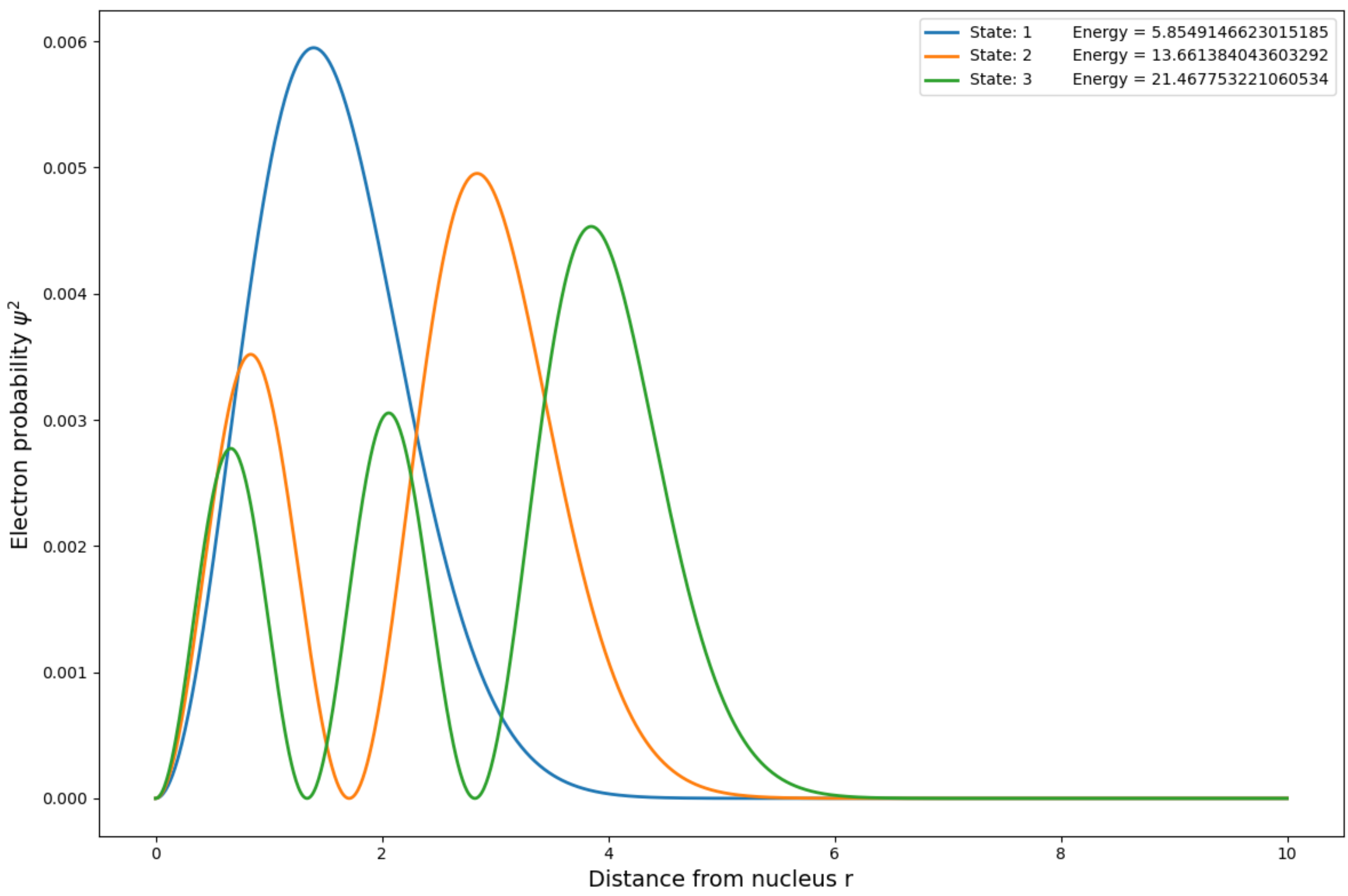
Изменяя потенциальную энергию системы, код может быть применен и к другим фундаментальным одномерным моделям, таким как системы квадратных колодцев и атом водорода. Можно продемонстрировать потенциальную энергию когда она константа, линейна от начала координат или квадратична от начала координат, демонстрация приведена ниже.



Константная потенциальная энергия



Линейная потенциальная энергия



Квадратичная потенциальная энергия

Определенно существует разница в вероятности нахождения электрона на определенном расстоянии от ядра.

Полный код можно посмотреть здесь.