Расчет спектра электрона в сферически симметричных потенциалах

Е.Г. Орлова, 3 курс
департамент Прикладной математики НИУ ВШЭ

Научный руководитель: Р.Ш. Ихсанов, доцент
департамент Электронной инженерии НИУ ВШЭ

22 мая 2017 г.

Постановка задачи

- Найти решение стационарного уравнения Шредингера для сферически симметричных потенциалов (потенциальная энергия частицы зависит только от расстояния между частицей и центром).
- Найти спектр – решить задачу на собственные значения вида:

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dr^2}+[V+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}])u=Eu.$$

Задача редко имеет аналитическое решение.

Численные методы

Для решения задачи на собственные значения применен метод конечных разностей.

- Использовалась разностная аппроксимация второго порядка:

$$u_n'' = \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{h^2};$$

$$\begin{bmatrix} u_1'' \\ u_2'' \\ u_3'' \\ \vdots \\ u_n'' \end{bmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix}.$$

Граничные условия

Волновая функция обычно экспоненциально затухает, поэтому с вычислительной точки зрения можно считать, что $u(r) = 0$ при $r \geq L$ для некоторого большого L.
Мы получаем задачу на собственные значения с граничными условиями $u(0) = 0$ (так как $u(r) = rR(r)$) и $u(L) = 0$.

Численные методы

Экстраполяция Ричардсона:

$$E_N - E = C(2h)^2,$$
$$E_{2N} - E = Ch^2,$$

$$E = \frac{4E_N - E_{2N}}{3}.$$

Также использовался метод Ньютона.

Тестирование численного решения на известные аналитические результаты

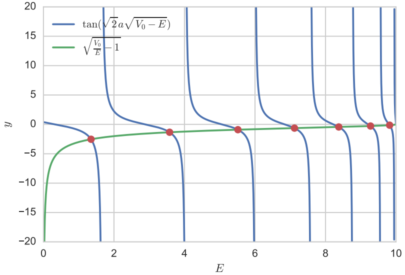
Для потенциальной ямы конечной глубины

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{if } r < R \\ 0, & \text{if } r > R \end{cases}$$

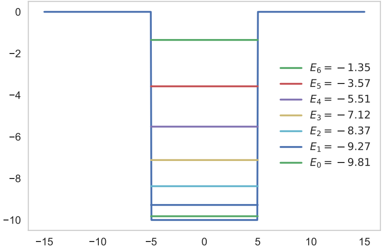
решение при $l = 0$ задается следующей формулой:

$$\tan(\sqrt{2}a\sqrt{V_0 - E}) = -\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}.$$

Результаты для потенциальной ямы конечной глубины



(a) $\tan(\sqrt{2}a\sqrt{V_0 - E}) = -\sqrt{\frac{V_0}{E} - 1}$



(b) Значения спектра (а. е.)

Рис. 1: Потенциальная яма конечной глубины

Гармонический осциллятор

Потенциал для гармонического осциллятора задается

$$V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2.$$

Аналитическое решение для спектра известно:

$$E_{nl} = \hbar\omega(2n + l + \frac{3}{2}), \quad n = 0,\ 1,\ 2, \ldots$$

Результаты для гармонического осциллятора

n	Численное	Аналитическое
0	0.519608	0.519615
1	1.212398	1.212436
2	1.905165	1.905256
3	2.597907	2.598076
4	3.290626	3.290897
5	3.983320	3.983717

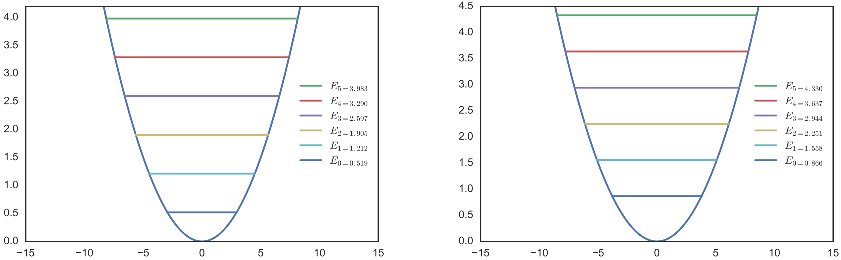
Таблица 1: $l = 0$

n	Численное	Аналитическое
0	0.866016	0.866025
1	1.558807	1.558846
2	2.251574	2.251666
3	2.944318	2.944486
4	3.637037	3.637307
5	4.329732	4.330127

Таблица 2: $l = 1$

Таблица 3: Возможные значения энергии для гармонического осциллятора

Иллюстрация для осциллятора



(a) $l = 0$ (b) $l = 1$

Рис. 2: Гармонический осциллятор

Атом водорода

Потенциал в атомных единицах задается

$$V(r) = -\frac{1}{r}.$$

Аналитическое решение для спектра известно:

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}, \quad n = 0,\ 1,\ 2, \ldots$$

Результаты для атома водорода

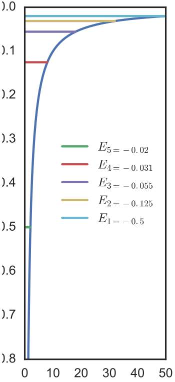


Рис. 3: Спектр атома водорода в а. е.

Результаты для атома водорода

n	Численное	Аналитическое
1	-0.499911	-0.500000
2	-0.124994	-0.125000
3	-0.055554	-0.055556
4	-0.031250	-0.031250
5	-0.020000	-0.020000

Таблица 4: Результаты для кулоновского потенциала в а. е.

Анализ сходимости метода

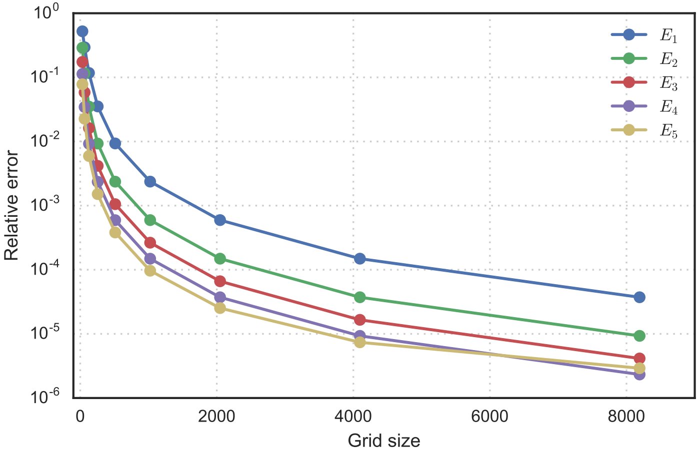


Рис. 4: Сходимость метода для кулоновского потенциала

Результаты

- Разработаны и реализованы численные методы для расчета спектра электрона в сферически симметричных потенциалах.
- Численные методы протестированы на известные аналитические решения или результаты других численных методов.

Перспективы

- Реализованные программы будут использованы в образовательном процессе магистерской программы "Материалы. Приборы. Нанотехнологии."
- Планируется публикация в журнал “Journal of chemical education”.
- Планируется продолжение темы в рамках НУГ “Математическое моделирование квантовых приборов и материалов” (Л.Н. Щур, М.Ю. Каган, Е.А. Буровский, Р.Ш. Ихсанов) в случае поддержки проекта.

Спасибо за внимание!