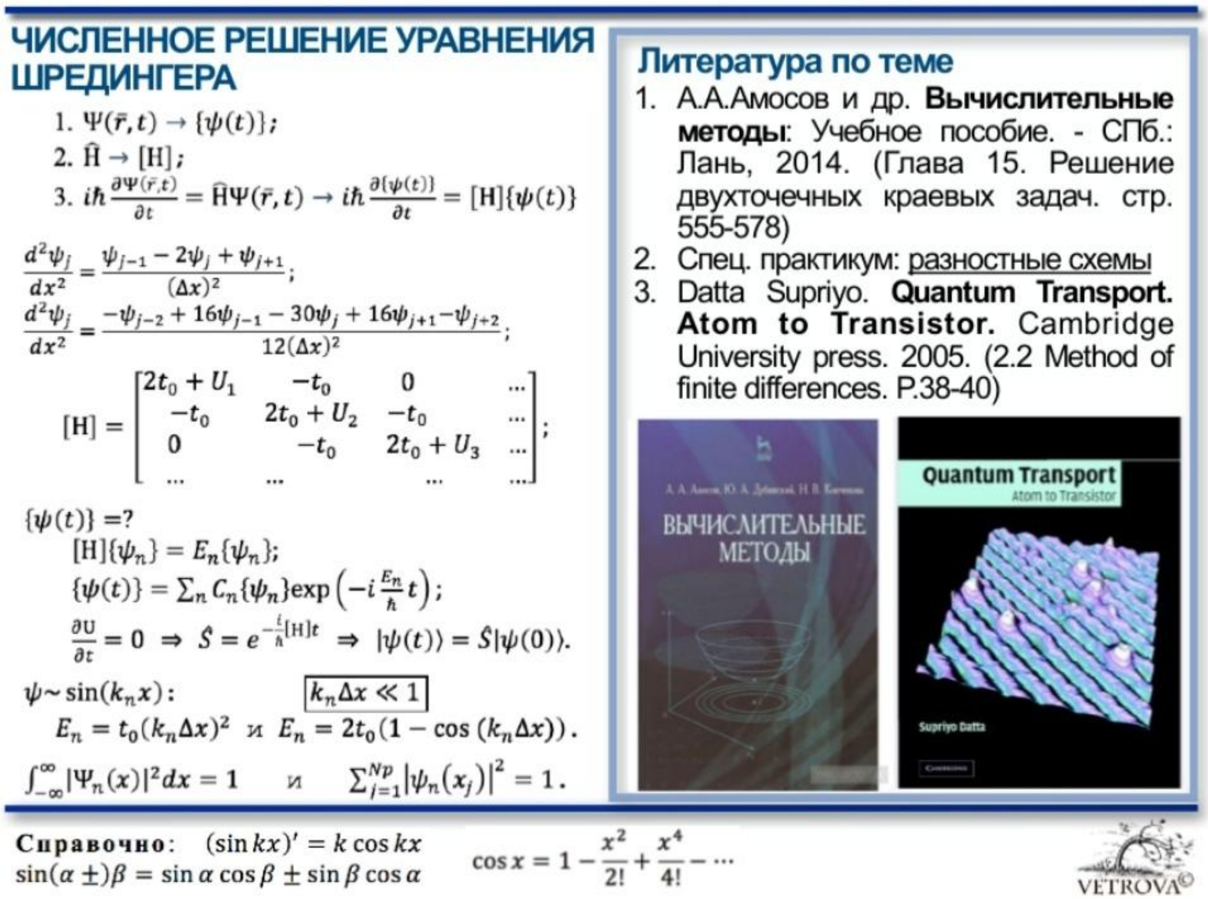
Филимонов Степан РЛ6-31

Лабараторная номер 5

Задача:

Построить график решения двух точечной краевой задачи при L = 10 нм.

Фото задания:



Теория:

Двухточечная краевая задача - это задача отыскания решения обыкновенного дифференциального уравнения или системы обыкновенных дифференциальных уравнений на отрезке $a \le x \le б$, в которой дополнительные условия на решение налагаются в двух точках а и б - "краях" отрезка (отсюда - и название задачи).

Решение:

Численное решение уравнения Шредингера(стационарного)

$$-\frac{\hbar}{2m}\Delta\psi(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

1. $\Psi(\bar{r}, t) \rightarrow \{\psi(t)\}$
2. $\widehat{\mathrm{H}} \rightarrow [\mathrm{H}]$;
3. $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\bar{r}, t) = \widehat{\mathrm{H}}\Psi(\bar{r}, t) \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\{\psi(t)\} = [\mathrm{H}]\{\psi(t)\}$

Из

$$\begin{cases} \psi_{i+1} = \psi_i + \Delta x\frac{d}{\mathrm{d}x}\psi_i + \frac{\Delta x^2}{2!}\frac{d^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_i + \frac{\Delta x^3}{3!}\frac{d^3}{\mathrm{d}x^3}\psi_i + \frac{\Delta x^4}{4!}\frac{d^4}{\mathrm{d}x^4}\psi_i + \ldots \\ \psi_{i-1} = \psi_i - \Delta x\frac{d}{\mathrm{d}x}\psi_i + \frac{\Delta x^2}{2!}\frac{d^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_i - \frac{\Delta x^3}{3!}\frac{d^3}{\mathrm{d}x^3}\psi_i + \frac{\Delta x^4}{4!}\frac{d^4}{\mathrm{d}x^4}\psi_i + \ldots \end{cases}$$

Получим:

$\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2} = \frac{d^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_i \Longrightarrow$ это трехточечная апроксимация оператора 2-ой производной , где

$$\mathrm{dx} = \frac{L}{N_p + 1}$$

Подставим его:

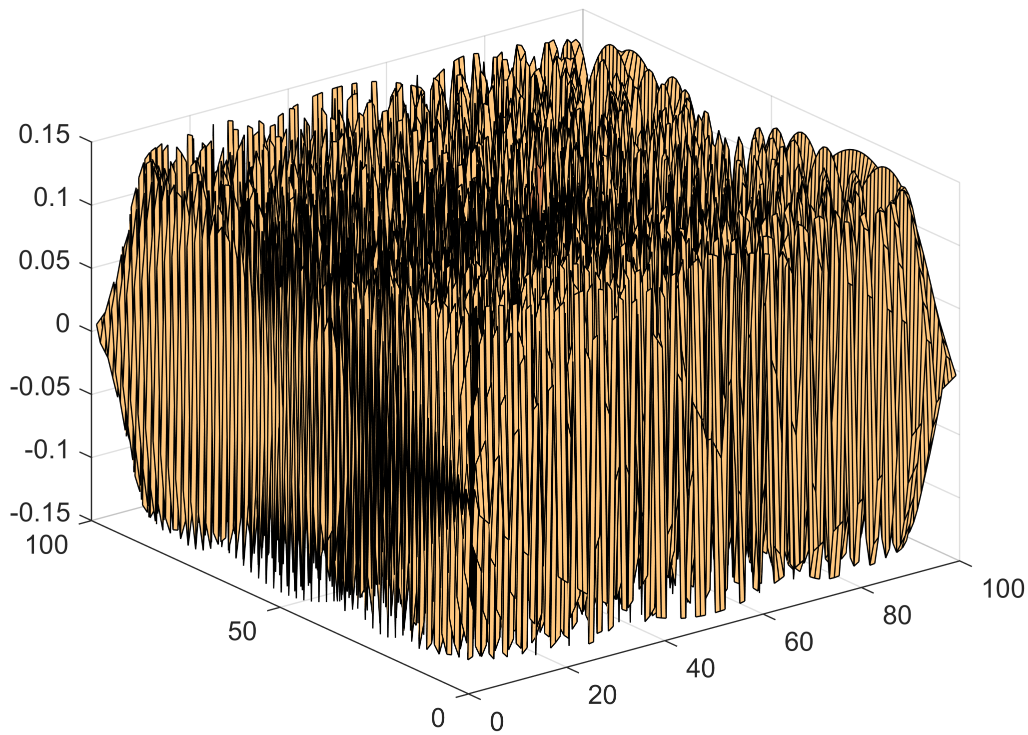
$$-\frac{\hbar}{2m}\left[\frac{\psi_{i+1} - 2\psi_i + \psi_{i-1}}{\Delta x^2}\right] + U_i\psi_i = E_i\psi_i$$

Матрицой этого уравнения будет

$[H] = \begin{bmatrix} 2x_0 + U_1 & -x_0 & 0 & \ldots \\ -x_0 & 2x_0 + U_2 & -x_0 & \ldots \\ 0 & -x_0 & 2x_0 + U_3 & \ldots \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{bmatrix}$, где x_0это константанта, равная $x_0 = \frac{\hbar^2}{2m} * \frac{1}{\mathrm{dx}}$, U_i - матрица увеличивающая высоту, в нашей задаче = 0, по этому при вычислении учитывотся не будет

Код Matlab:

```
cla reset;
L = 10;
Np = 100;
[X, Y] = matrixSchrodinger(L, Np); %*(см. ниже)
surf(X, Y);
colormap("copper");
```




```
datetime('now')
```

```
ans = datetime
   17-Oct-2021 11:58:53
```

*Функция создания графика:

```
function [X, Y] = matrixSchrodinger(L, Np)
 load('constans.mat',"hbar","m0");
 x0 = hbar^2 / (2 * m0 * ((L * 1e-9) / (Np + 1)));
 H = zeros(Np); % заполним матрицу нулями
 for r = 1:Np
   for c = 1:Np
     if r == 1
       if r == c
         H(r, c) = -2 * x0;
         H(r, c + 1) = x0;
       end
     end
     if and(r ~= 1, r ~= Np )
       if r == c
         H(r, c) = -2 * x0;
         H(r, c - 1) = x0;
         H(r, c + 1) = x0;
       end
     end
     if r == Np
```

```
        if r == c
          H(r, c) = -2 * x0;
          H(r, c - 1) = x0;
        end
      end
    end
  end
  [X, Y] = eig(H); % вернем диагональную матрицу
end
```