



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Московский государственный технический университет
имени Н. Э. Баумана
(национальный исследовательский университет)»
(МГТУ им. Н. Э. Баумана)

ФАКУЛЬТЕТ _____ Фундаментальные науки

КАФЕДРА _____ Прикладная математика

РАСЧЕТНО-ПОЯСНИТЕЛЬНАЯ ЗАПИСКА
К КУРСОВОЙ РАБОТЕ
НА ТЕМУ:

***Расчет собственных значений стационарных
состояний уравнения Шредингера***

Студент _____
ФН2-62Б
(Группа)

(Подпись, дата)

А. В. Попов

(И. О. Фамилия)

Руководитель курсовой работы

(Подпись, дата)

И. В. Деревич

(И. О. Фамилия)

2022 г.

Оглавление

Введение	3
1. Уравнение Шредингера	3
2. Постановка задачи	4
3. Метод Нумерова	6
4. Тестовые расчеты	8
4.1. Нулевой потенциал	8
4.2. Симметричный потенциал	10
4.3. Асимметричный потенциал	12
5. Заключение	14
Список использованных источников	15

Введение

Уравнение Шредингера (Schrödinger equation) является основным уравнением квантовой физики, а нахождение его решения со времен его появления остается важной научной задачей. Существенно, целый ряд задач микрофизики (атомная и ядерная физика, квантовая механика и др.) сводится к проблеме одномерного стационарного уравнения Шредингера. Задача заключается в поиске набора собственных функций, которые являются решениями уравнения, и соответствующего набора собственных значений.

Аналитические решения уравнения известны лишь для ограниченного набора потенциалов, поэтому для поиска собственных функций и значений все чаще используются различные численные методы.

В данной курсовой работе представлен алгоритм для решения одномерного стационарного уравнения Шредингера с произвольным потенциалом. Алгоритм основан на методе Нумерова. Реализация представлена на языке C++.

1. Уравнение Шредингера

Как известно, вид волнового уравнения физической системы определяется ее гамильтонианом, который играет фундаментальное значение во всем математическом аппарате квантовой механики.

Будем рассматривать движение некоторой частицы в потенциальной яме. Общая форма уравнения Шредингера, описывающего данную частицу — это форма, включающая зависимость от времени и от всех трех пространственных координат:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t), \quad (1.1)$$

где \hat{H} — оператор Гамильтона. Далее, предполагая, что задача одномерная и оператор Гамильтона не зависит от времени, решение будем искать в виде:

$$\Psi(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} Et\right) \cdot \Psi(x),$$

где E — полная энергия частицы [1]. Тогда подставляя в (1.1) получаем

$$\hat{H} \Psi(x) = E \Psi(x). \quad (1.2)$$

Гамильтониан для одной частицы в классической механике имеет представление:

$$H(p, q) = \frac{p^2}{2m} + u(q),$$

где p, q – импульс и координата частицы соответственно, m – масса частицы, а $U(q)$ – действующий потенциал сил. Используя оператор импульса получаем вид оператора Гамильтона в квантовой механике:

$$\hat{p} = -i\hbar\nabla,$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} + U(x).$$

Получаем одномерное уравнение Шредингера для стационарного распределения

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi''(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (1.3)$$

2. Постановка задачи

Для движения в потенциальной яме, решением (1.3) будет являться набор собственных функций и собственных значений, поэтому имеет место запись

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Psi_n''(x) + U(x)\Psi_n(x) = E_n\Psi_n(x). \quad (2.1)$$

Полагая, что яма обладает бесконечно высокими стенками (рис. 1), добавим к задаче граничные условия.

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0, \\ U(x), & 0 < x < L, \\ \infty, & x \geq L. \end{cases}$$

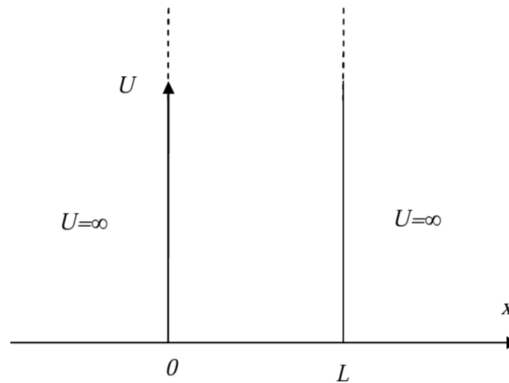


Рис. 1. Схема потенциальной ямы, в которой движется частица

Получили задачу Штурма — Лиувилля со следующими граничными условиями

(данные граничные условия вытекают из условий регулярности волновой функции):

$$\begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m}\Psi_n''(x) + (E_n - U(x))\Psi_n(x) = 0, \\ \Psi_n(0) = 0, \quad \Psi_n(L) = 0. \end{cases} \quad (2.2)$$

Для численного интегрирования необходимо привести задачу к безразмерному виду. Введем следующие замены:

$$\tilde{x} = \frac{x}{L}, \quad 0 < \tilde{x} < 1; \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{mL^2}, \quad \tilde{E} = \frac{E}{E_0}, \quad \tilde{U}(\tilde{x}) = \frac{U(x)}{E_0}.$$

Из условий нормировки собственных функций имеем

$$\int_0^L |\Psi|^2 dx = 1.$$

Тогда безразмерные волновые функции представим в виде

$$\tilde{\Psi}_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \Psi_n.$$

Таким образом, получаем задачу Штурма — Лиувилля в безразмерном виде:

$$\begin{cases} \tilde{\Psi}_n''(\tilde{x}) + 2(\tilde{E}_n - \tilde{U}(\tilde{x}))\tilde{\Psi}_n(\tilde{x}) = 0, & 0 < \tilde{x} < 1, \\ \tilde{\Psi}_n(0) = 0, \quad \tilde{\Psi}_n(1) = 0, & \int_0^1 |\tilde{\Psi}|^2 d\tilde{x} = 1. \end{cases} \quad (2.3)$$

Для дальнейшего численного интегрирования запишем ОДУ в специальной форме:

$$\tilde{\Psi}_n''(\tilde{x}) + k^2(E_n, \tilde{x})\tilde{\Psi}_n(\tilde{x}) = 0, \quad k^2(E_n, \tilde{x}) = 2(\tilde{E}_n - \tilde{U}(\tilde{x})).$$

Запись $k = k(E_n, \tilde{x})$ является в большей степени формальной, и показывает то, что в этой вспомогательной переменной содержится интересующее нас собственное значение энергии. Также, далее будем полагать, что все величины уже являются безразмерными, поэтому итоговая задача примет вид:

$$\Phi_n''(x) + k^2(E_n, x)\Phi_n(x) = 0, \quad k^2(E_n, x) = 2(E_n - U(x)) = k^2(x). \quad (2.4)$$

В свою очередь (2.4) будет подкрепляться теми же граничными условиями и условиями нормировки, что и (2.3).

3. Метод Нумерова

Непосредственное численное интегрирование (2.4) будем проводить методом Нумерова или, как его еще называют в некоторых источниках, методом Коуэлла [2]. Сам расчет собственных значений будет основан на вариации метода "пристрелки". Метод Нумерова — численный метод решения обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, в которых не фигурирует член первого порядка. Метод является многошаговым и обладает вторым порядком точности (рис. 2). Локальная погрешность метода имеет четвертый порядок.

Одной из особенностей метода является повышение порядка производной до четвертого, поэтому, прежде необходимо сделать предварительные расчеты.

Введем на отрезке $X = [0, 1]$ равномерную сетку, с шагом $h = 1/N$ и количеством узлов $N + 1$:

$$\omega_h = \{x_i \mid 0 \leq x_i \leq 1, 0 \leq i \leq N, x_0 = 0, x_N = 1\}.$$

Полагая, что функция Φ определена во всех точках отрезка $[0, 1]$, спроецируем ее на сетку. Значения функции в узлах сетки будем обозначать

$$\Phi(x_i) = y_i, \quad y_0 = y_N = 0.$$

Разностную производную второго порядка будем вычислять стандартным способом:

$$y_i'' = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}. \quad (3.1)$$

Посчитаем для (3.1) погрешность аппроксимации:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y(x_i + h) \approx \Phi(x_i) + h\Phi'(x_i) + \frac{h^2}{2}\Phi''(x_i) + \frac{h^3}{6}\Phi'''(x_i) + \frac{h^4}{24}\Phi''''(x_i), \\ y_{i-1} &= y(x_i - h) \approx \Phi(x_i) - h\Phi'(x_i) + \frac{h^2}{2}\Phi''(x_i) - \frac{h^3}{6}\Phi'''(x_i) + \frac{h^4}{24}\Phi''''(x_i), \\ \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} &\approx \frac{1}{h^2} \left(\Phi(x_i) + h\Phi'(x_i) + \frac{h^2}{2}\Phi''(x_i) + \frac{h^3}{6}\Phi'''(x_i) + \frac{h^4}{24}\Phi''''(x_i) - \right. \\ &\quad \left. 2\Phi(x_i) + \Phi(x_i) - h\Phi'(x_i) + \frac{h^2}{2}\Phi''(x_i) - \frac{h^3}{6}\Phi'''(x_i) + \frac{h^4}{24}\Phi''''(x_i) \right) = \Phi''(x_i) + \frac{h^2}{12}\Phi''''(x_i) + O(h^4). \end{aligned} \quad (3.2)$$

Отсюда, оценка истинной второй производной равна

$$\Phi''(x_i) \approx \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12}\Phi''''(x_i) \approx -k^2(x_i)y_i. \quad (3.3)$$

Далее переходим к построению самого итерационного метода. Продифференцируем (2.4) два раза и во второй производной перейдем к разностному соотношению, полагая, что функция $k^2(x)$ также определена в узлах сетки:

$$\begin{aligned}\Phi''''(x) + \left(k(x)\Phi(x)\right)'' &= 0, \\ \Phi''''(x_i) + \frac{k_{i+1}^2 y_{i+1} - 2k_i^2 y_i + k_{i-1}^2 y_{i-1}}{h^2} &= 0.\end{aligned}\tag{3.4}$$

Из (3.2) соотношение для четвертой производной:

$$\Phi''''(x_i) = \frac{12}{h^2} k_i^2 y_i + \frac{12}{h^2} \cdot \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}.$$

Подставляем полученное выражение в (3.4):

$$\frac{12}{h^2} k_i^2 y_i + \frac{12}{h^2} \cdot \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + \frac{k_{i+1}^2 y_{i+1} - 2k_i^2 y_i + k_{i-1}^2 y_{i-1}}{h^2} = 0.\tag{3.5}$$

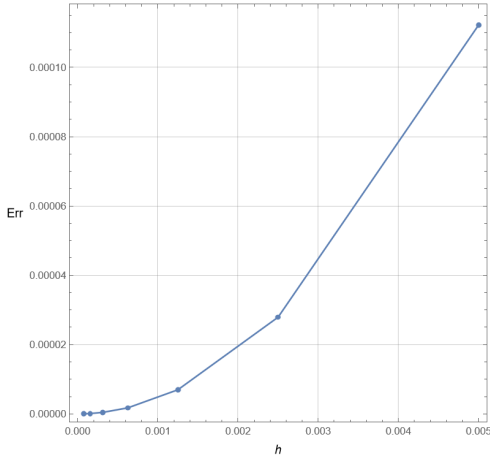
Выразим из (3.5) y_{i+1} и получим рекуррентную формулу:

$$\begin{aligned}y_{i+1} \left(\frac{12}{h^4} + \frac{k_{i+1}^2}{h^2} \right) + y_i \left(\frac{12k_i^2}{h^2} - \frac{24}{h^4} - 2\frac{k_i^2}{h^2} \right) + y_{i-1} \left(\frac{12}{h^4} + \frac{k_{i-1}^2}{h^2} \right) &= 0, \\ y_{i+1} \left(\frac{12}{h^2} + k_{i+1}^2 \right) + y_i \left(10k_i^2 - \frac{24}{h^2} \right) + y_{i-1} \left(\frac{12}{h^2} + k_{i-1}^2 \right) &= 0, \\ \frac{12}{h^2} y_{i+1} \left(1 + \frac{h^2}{12} k_{i+1}^2 \right) - \frac{12}{h^2} \cdot 2y_i \left(1 - \frac{5h^2}{12} k_i^2 \right) + \frac{12}{h^2} y_{i-1} \left(1 + \frac{h^2}{12} k_{i-1}^2 \right) &= 0, \\ y_{i+1} &= \frac{2y_i \left(1 - \frac{5h^2}{12} k_i^2 \right) - y_{i-1} \left(1 + \frac{h^2}{12} k_{i-1}^2 \right)}{1 + \frac{h^2}{12} k_{i+1}^2}.\end{aligned}$$

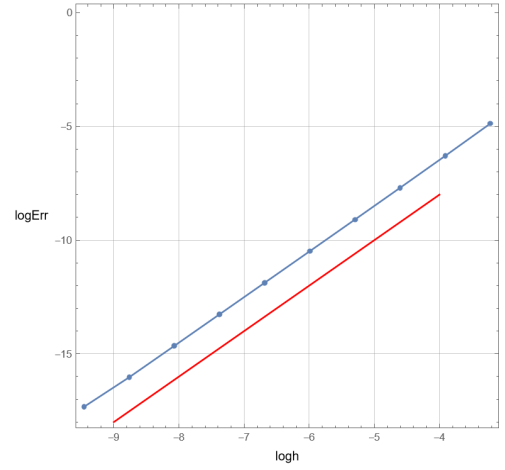
Для данного итерационного процесса сохраняются начальные условия, присущие исходной задаче, а именно $y_0 = y_N = 0$. Но также необходимо заметить, что помимо начального условия, для старта алгоритма нужно каким-то образом определить значение y_1 . Определим y_1 произвольно, например $y_1 = 1/N$, а перед записью результата в файл будем нормировать функцию.

Основная идея метода пристрелки здесь заключается в следующем: обратившись к (2.4) можно увидеть, что переменная $k^2(x)$ зависит не только от внешнего потенциала, но и от собственного значения — энергии для n -ого уровня; фиксируя левое граничное условие $y_0 = 0$, мы начинаем варировать значение энергии, пока итерационный процесс не "пристреляется" к правому граничному условию $y_N = 0$.

Обозначим y_N^i - значение функции в последнем узле при i -ом значении энергии E^i . Будем прибавлять постоянный шаг к пробному начальному значению энергии $E^i = 0$,



(а) Стандартный масштаб



(б) Логарифмический масштаб

Рис. 2. Визуализация порядка точности метода Нумерова

и как только $y_N^{i-1} \cdot y_N^i \leq 0$, то процесс поиска приостанавливаем. Затем, с помощью любого численного метода нахождения корня, с нужной точностью определяем значение E_n , понимая, что оно находится между E^{i-1} и E^i . Определив E_n , можем непосредственно построить Φ_n .

Метод является явным, что делает его алгоритмически простым для реализации. Также, он обладает вторым порядком аппроксимации, это видно из разложения (3.2). В отличие от методов Рунге—Кутты, вычислять дополнительные значения функции в промежуточных точках не требуется.

4. Тестовые расчеты

4.1. Нулевой потенциал

В качестве первого тестового примера рассмотрим тривиальную задачу о движении частицы в прямоугольной потенциальной яме с непроницаемыми стенками и нулевым потенциалом вблизи дна ямы:

$$\Phi_n''(x) + k^2(x)\Phi_n(x) = 0, \quad k^2(x) = 2E_n = k^2.$$

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0, \\ 0, & 0 < x < 1, \\ \infty, & x \geq 1. \end{cases}$$

Учитывая граничные условия $\Phi(0) = \Phi(1) = 0$ и условия нормировки $\int_0^1 |\Phi|^2 dx = 1$,

аналитическое решение выглядит следующим образом (рис. 2) :

$$\begin{aligned}\Phi_n(x) &= \sqrt{2} \sin \pi n x, \quad n = \pm 1, 2, 3, 4... \\ E_n &= \frac{\pi^2 n^2}{2}, \quad n = 1, 2, 3, 4...\end{aligned}\tag{4.1}$$

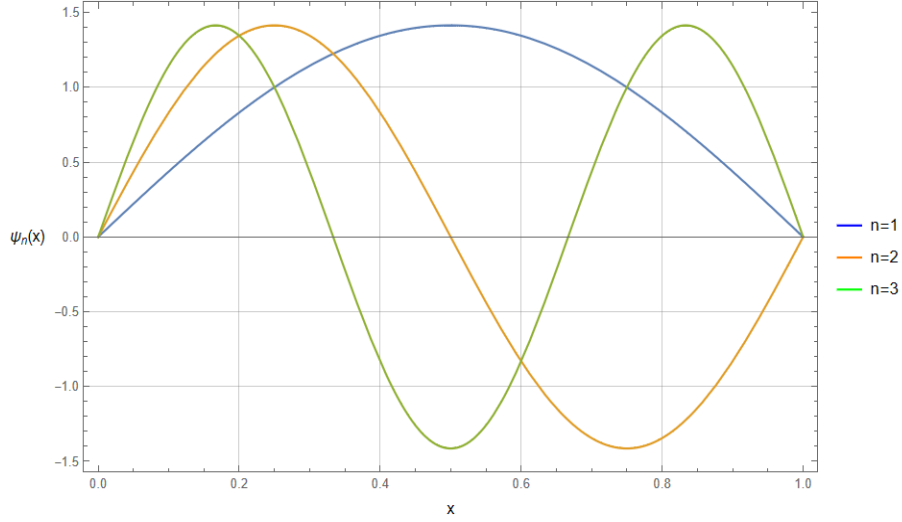


Рис. 3. Первые три собственные функции для задачи о нулевом потенциале

Прежде, чем переходить к численному расчету решим, как нам определять нужную точность. Для начала выберем шаг, пусть это будет $h = 1$, с которым мы начнем двигаться от начального значения энергии (см. 3). Как только $y_N^i \cdot y_N^{i-1} \leq 0$, то дальше передаем значения энергии в функцию одномерной минимизации вместе с заданной точностью. Недостатком такого метода может послужить то, что на отрезке $[E_n^{i-1}; E_n^i]$ в общем случае может быть несколько корней.

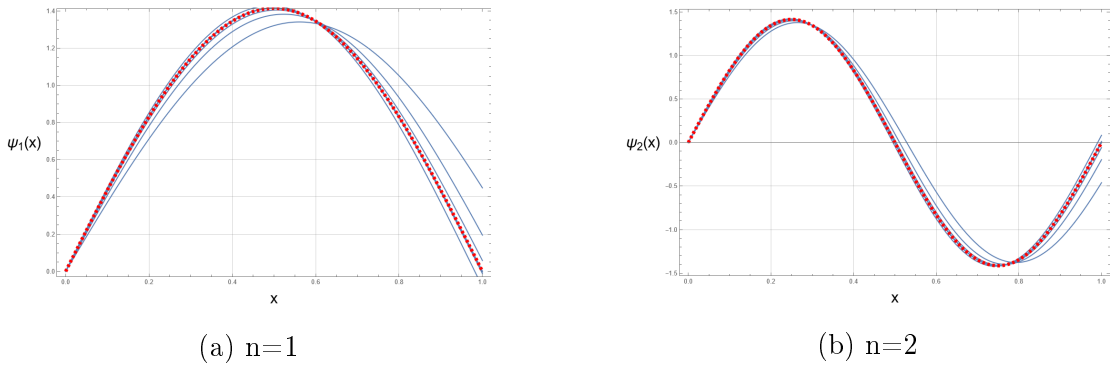


Рис. 4. Визуализация метода Нумерова для задачи о нулевом потенциале

Для запуска итерационного процесса введем равномерную сетку

$$\omega_h = \{x_i \mid 0 \leq x_i \leq 1, 0 \leq i \leq N, x_0 = 0, x_N = 1\},$$

и условие точности $|y_N^i - y_N^{i-1}| < \varepsilon$. На рис.3 и рис.4 можно увидеть визуальное представление работы метода Нумерова. Красным отмечено аналитическое решение. При точности $\varepsilon = 0.00001$ алгоритму хватает около 10-12 итераций одномерной минимизации. В таблице 1 приведены первые десять собственных значений, рассчитанных численным методом.

Таблица 1. Первые десять собственных значений ($h = 0.01, \varepsilon = 0.00001$)

Номер уровня	Значение из аналитического решения	Численное решение
1	4.9348	4.9446
2	19.7392	19.7787
3	44.4132	44.0159
4	78.9568	78.9903
5	123.3767	123.1105
6	177.6531	177.2915
7	241.8059	242.0731
8	315.8272	315.0182
9	493.4814	494.0045
10	597.1115	598.0045

Точность численного вычисления регулируется исключительно функцией одномерной минимизации. В данной курсовой работе используется метод половинного деления (метод дихотомии).

4.2. Симметричный потенциал

В качестве задачи с симметричным потенциалом [3] (рис. 5) рассмотрим

$$\Phi_n''(x) + k^2(x)\Phi_n(x) = 0, \quad k^2(x) = 2(E_n - U(x)) = k^2.$$

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0, \\ 100 \exp\left(-\frac{(x-0.5)^2}{0.225}\right), & 0 < x < 1, \\ \infty, & x \geq 1. \end{cases} \quad (4.2)$$

Задав параметры задачи, а также принцип регулировки точности, как и в предыдущей задаче, рассчитаем численно первые несколько собственных функций. Визуализация представлена на рис. 6.

Путем численного интегрирования была проверена линейная независимость данных

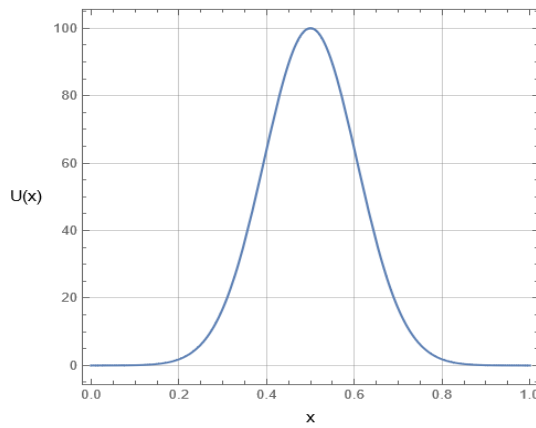


Рис. 5. Симметричный потенциал

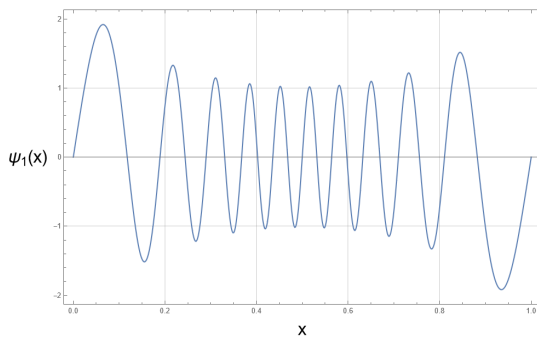
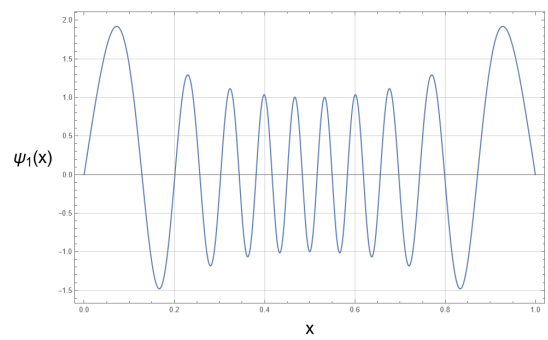
(a) $n=1$ (b) $n=2$

Рис. 6. Собственные функции для задачи (4.2)

функций, а именно:

$$\int_0^1 \Phi_n^*(x) \Phi_m(x) dx = \delta_{n,m}$$

Далее представлена визуализация зависимости y_N от значения E_n .

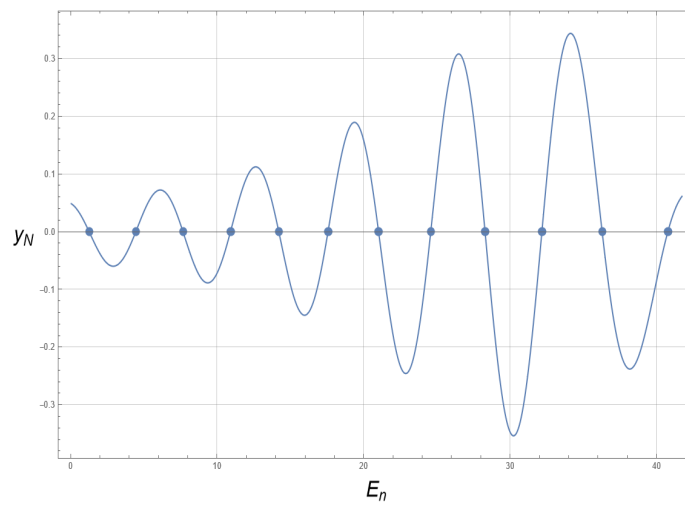


Рис. 7. Визуализация характеристической функции для (4.2)

Здесь точками обозначены значения собственных энергий. Можно заметить, что характеристическая функция имеет осциллирующую структуру.

Произвести сравнение численного решения с аналитическим не представляется возможным, так как второе неизвестно. Однако, тот факт, что в предыдущей задаче численное решение было получено с некоторой погрешностью, позволяет заключить, что и тут результат является верным.

4.3. Асимметричный потенциал

Для примера численного расчета с асимметричным потенциалом был выбран потенциал содержащий тригонометрическую функцию рис. 8. Более сложные асимметричные потенциалы, например потенциал Кратцера [4], как правило выражены в полярных (одномерный случай) или сферических (трехмерный случай) координатах и в данной работе рассматриваться не будут.

Перед нами стоит задача

$$\Phi_n''(x) + k^2(x)\Phi_n(x) = 0, \quad k^2(x) = 2(E_n - U(x)) = k^2.$$

$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x \leq 0, \\ 100 \cos \pi x, & 0 < x < 1, \\ \infty, & x \geq 1. \end{cases} \quad (4.3)$$

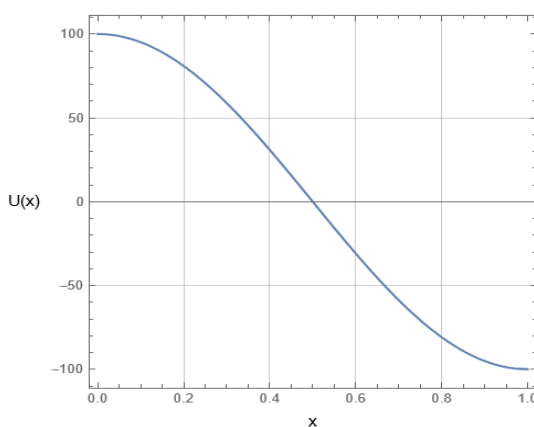


Рис. 8. Простейший асимметричный потенциал

Найденные численным методом собственные функции изображены на рис.9.

Для асимметричных потенциалов, известные алгоритмы и программы, как правило, обладают недостатками, связанными как с точностью, так и с надежностью получаемых результатов [3]. Для нашего алгоритма проверить корректность полученных результатов не представляется возможным по тем же причинам, что и в предыдущем пункте.

Визуализация характеристической функции представлена на рис.10. В отличие от предыдущего примера, в случае асимметричного потенциала наблюдается более хаотичная структура данной функции.

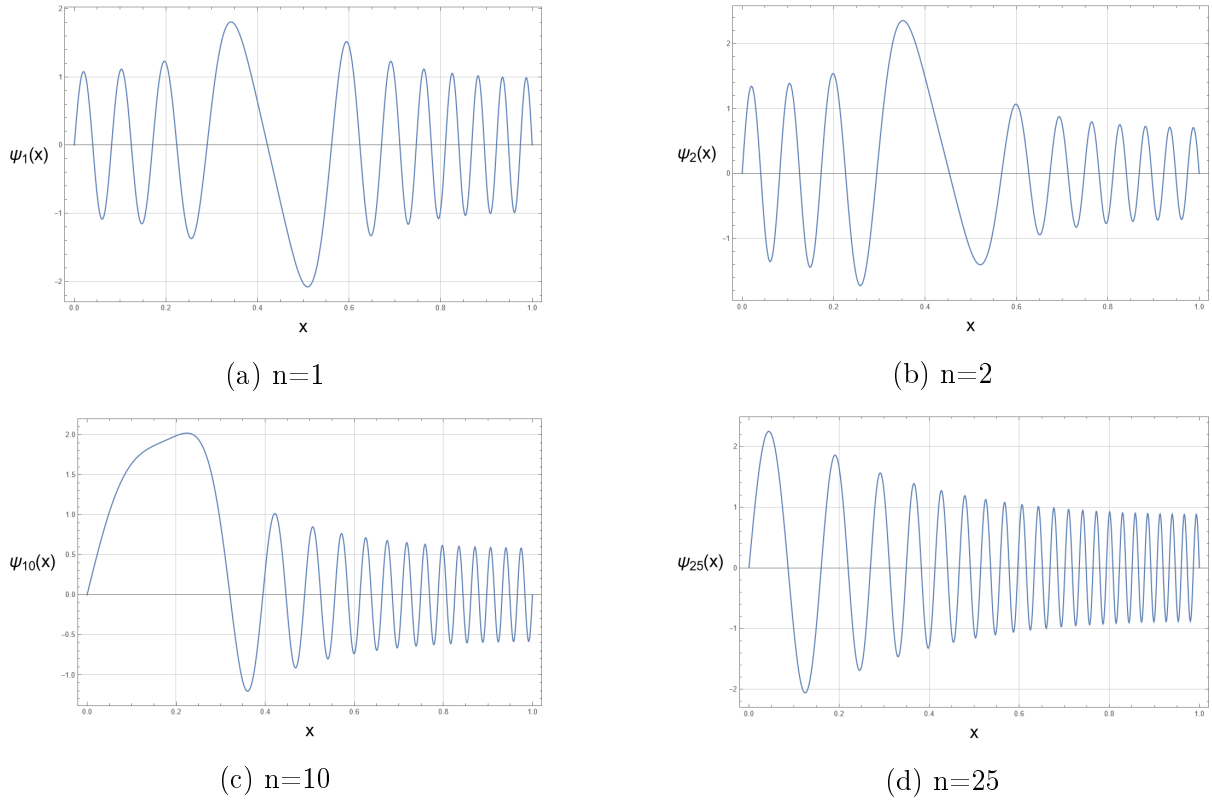


Рис. 9. Собственные функции для задачи (4.3)

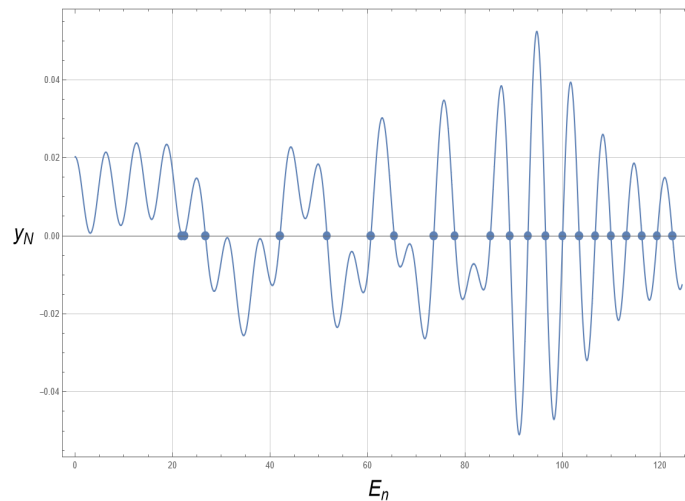


Рис. 10. Визуализация характеристической функции для (4.3)

Таким образом, пристрелочный метод Нумерова одинаково дает решение как в случае тривиального, так и в случаях более сложного потенциала, что свидетельствует о его применимости для решение различных задач.

5. Заключение

В данной курсовой работе была поставлена задача численного решения стационарного одномерного уравнения Шредингера в общем случае с произвольным потенциалом. Данная проблема была решена с помощью метода Нумерова, и включенного в него метода "пристрелки". Для нескольких тестовых задач был найден набор собственных функций и собственных значений.

На примере тривиального потенциала было найдено численное решение, которое было сопоставлено с известным аналитическим. Между ними проиллюстрировано удовлетворительное согласие, что отмечает относительно высокую точность метода.

Также, были рассмотрены случаи с симметричным и асимметричным потенциалами. Алгоритм показал свою работоспособность и в этом случае. Конечно, абсолютно утверждать о правильности полученных результатов нельзя, так как для данных примеров неизвестно аналитическое решение.

Список использованных источников

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). — Издание 6-е, исправленное. М.: Физматлит, 2004. 800 с
2. Хайпер Э., Нёрсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Нежесткие задачи. М.: Мир, 1990. 512 с.
3. Bittner, E. R. Numerov Solutions for Single- and Double-Well Potentials. 2010. Mode of access: <http://demonstrations.wolfram.com/NumerovSolutionsForSingleAndDoubleWellPotentials/>.
4. Флюгге, З. Задачи по квантовой механике / З. Флюгге. М. : Мир, 1974. Т. 1. 340 с.