Расчет собственных значений стационарных состояний уравнения Шредингера

Докладчик: Попов А.В.

Научный руководитель: д.т.н., профессор кафедры ФН2
Деревич И.В.

группа ФН2-62Б

24 мая 2023 г.

Уравнение Шредингера. Общие соображения

Одномерное стационарное уравнение Шредингера для движения частицы в потенциальной яме с непроницаемыми стенками

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

Здесь $\hbar$ – приведенная постоянная Планка, m – масса частицы, $U(x)$ – внешний потенциал, E – полная энергия частицы, $\psi(x)$ –неизвестная волновая функция.

Граничные условия и условия нормировки

$$\begin{cases} \psi(0) = \psi(L) = 0, \\ \int\limits_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \end{cases}$$

Внешний потенциал

$$\mathrm{U}(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ U(x), & 0 < x < L; \\ \infty, & x > L; \end{cases}$$

Постановка Задачи

Введем следующие замены

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

Из условий нормировки получаем:

$$\widetilde{\psi}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\psi(x) = \Phi(x)$$

Тогда задача в безразмерном виде примет вид:

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\Phi_n(x)}{dx^2} + k^2(\tilde{E}_\mathrm{n}, x)\Phi_n(x) = 0, \\ \Phi_n(0) = \Phi_n(1) = 0. \end{cases}$$

$$k^2(\tilde{E}_\mathrm{n}, x) = k^2(x) = 2(\tilde{E}_\mathrm{n} - \widetilde{U}(\mathrm{x}))$$

Метод Нумерова. Получение расчетной формулы

Введем сетку $\omega_h = \{x_i \mid 0 \le x_i \le 1, 0 \le i \le N, \quad x_0 = 0, \quad x_N = 1\}$ $\Phi(x_i) = y_i \quad y_0 = y_N = 0$

Вычислим разностную производную второго порядка $y_i'' = \dfrac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}$

Посчитав погрешность аппроксимации получим:

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

Дважды продифференцируем исходное уравнение:

$$\Phi''''(x_i) + (k^2(x_i)\Phi(x_i))'' = 0 \qquad \rightarrow \qquad \Phi''''(x_i) + \frac{k_{i+1}^2 y_{i+1} - 2k_i^2 y_i + k_{i-1}^2 y_{i-1}}{h^2} = 0 \qquad (**)$$

Соединив $(*)$ и $(**)$ получим рекуррентную формулу

$$\boxed{y_{i+1} = \frac{2y_i\left(1 - \frac{5h^2}{12} k_i^2\right) - y_{i-1}(1 + \frac{5h^2}{12} k_{i-1}^2)}{1 + \frac{h^2}{12} k_{i+1}^2}}$$

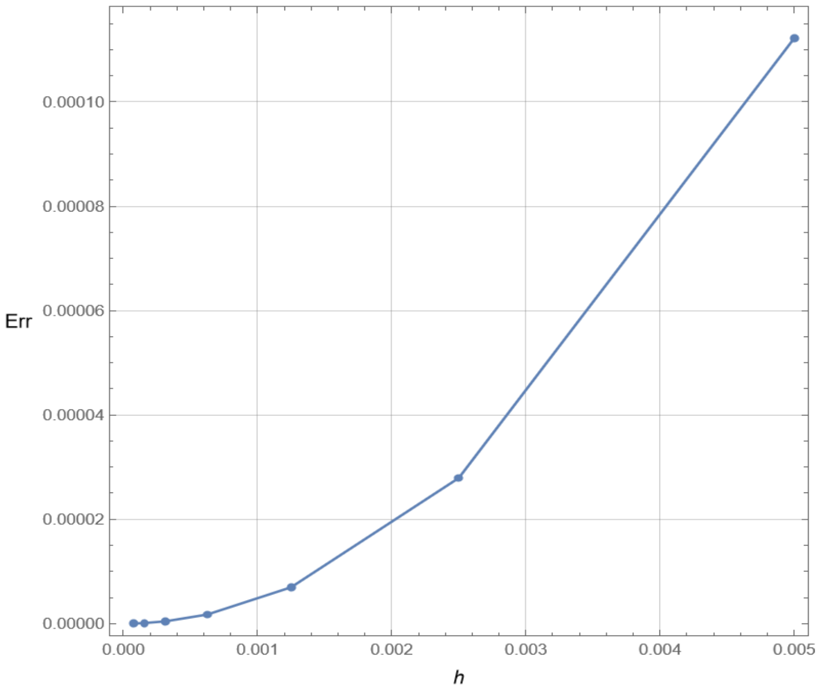
Для начала расчета зададим

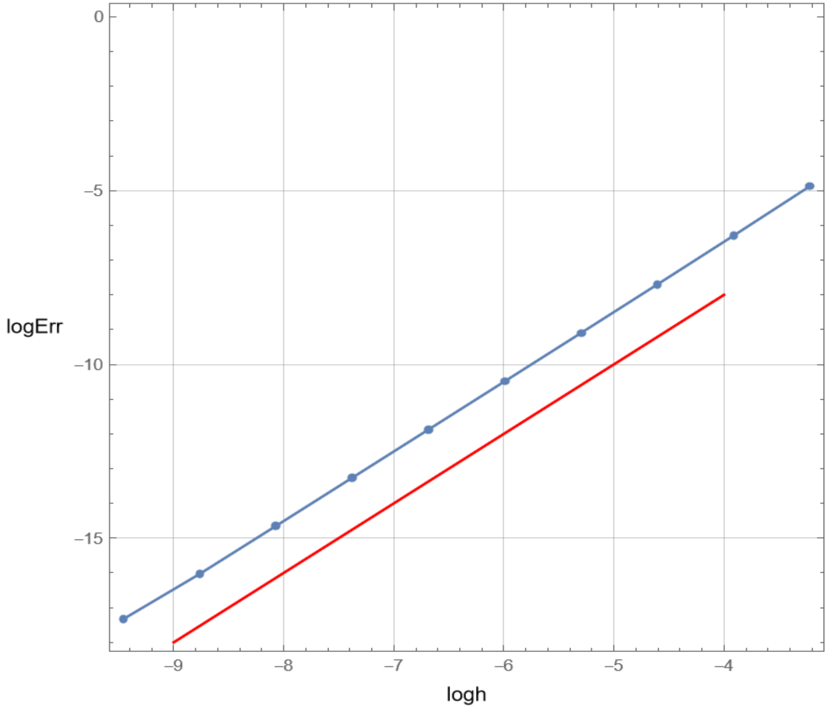
$$y_0 = 0, \qquad y_1 = 1/N$$

Метод Нумерова. Определение порядка точности

Модельная задача с известным аналитическим решением:

$$\frac{d^2\Phi_n(x)}{dx^2} + (\pi n)^2\Phi_n(x) = 0, \qquad \Phi_n(0) = \Phi_n(1) = 0. \quad \rightarrow \quad \Phi_n(x) = \sqrt{2}\sin(\pi n x)$$

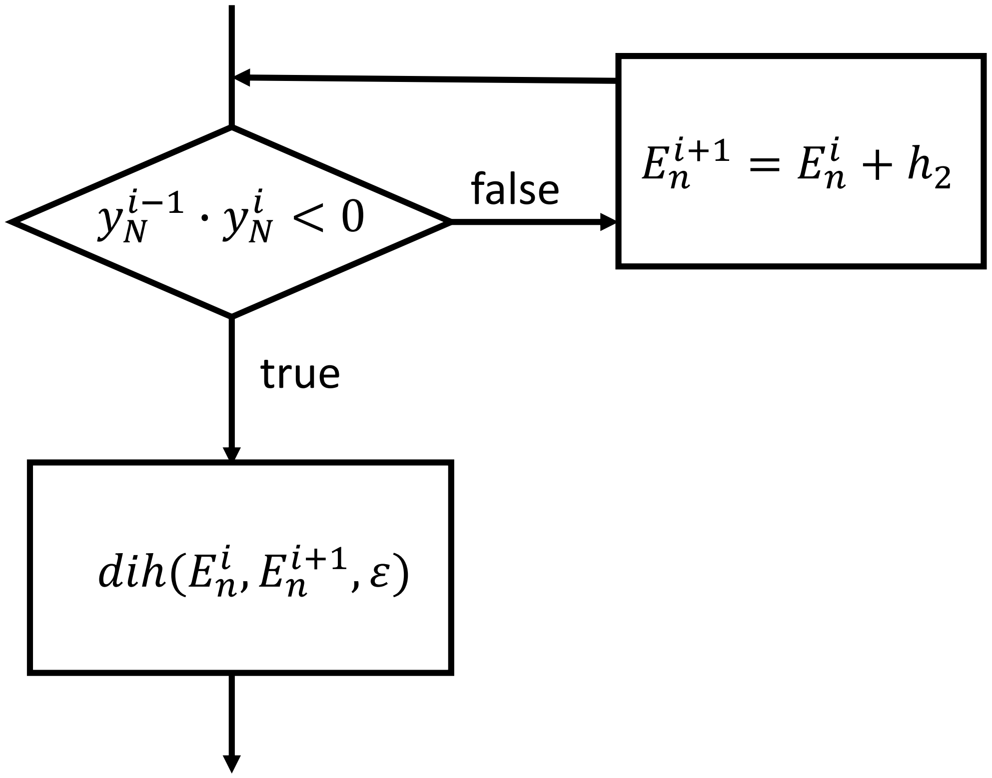




Метод Нумерова. Реализация «пристрелки» собственных значений

Коэффициент $k^2(x)$ зависит от собственного значения: $k^2(x) = 2(E_\mathrm{n} - U(\mathrm{x}))$

Путем вариации $\tilde{E}_\mathrm{n}$ мы можем добиться выполнения правого граничного условия $y_N = 0$



$h_2 = 1$

Здесь dih – одномерная функция поиска корня на заданном интервале с заданной точностью

Представление результатов. Нулевой потенциал

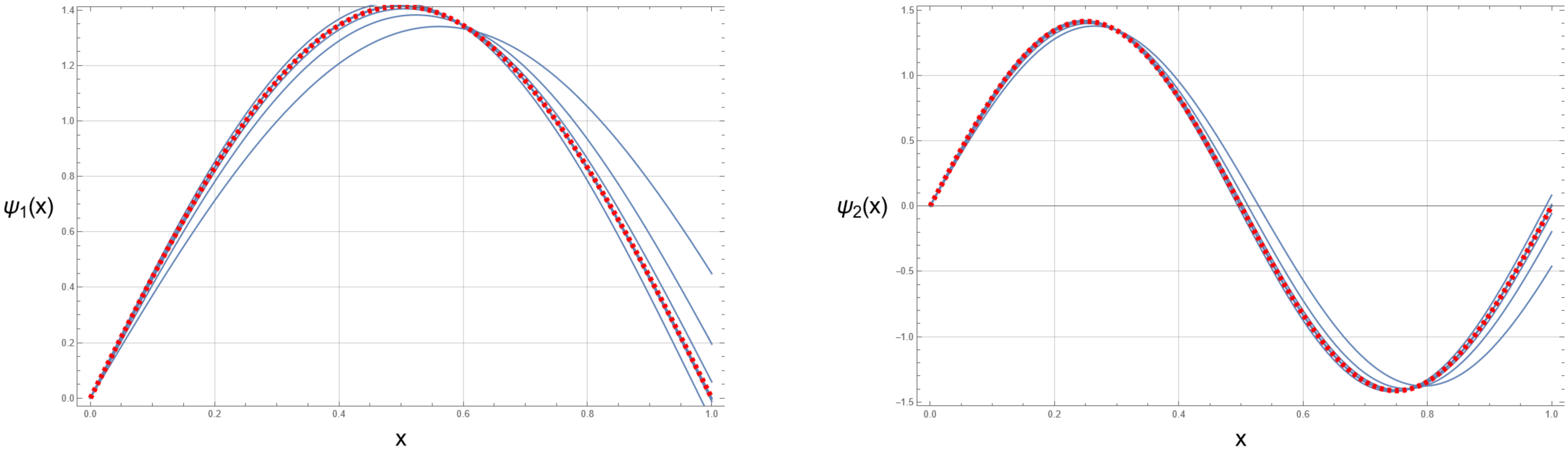
Рассмотрим задачу с нулевым потенциалом
$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ 0, & 0 < x < 1; \\ \infty, & x > 1; \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dfrac{d^2\Phi_n(x)}{dx^2} + k^2(\tilde{E}_\mathrm{n}, x)\Phi_n(x) = 0, \\ \Phi_n(0) = \Phi_n(1) = 0. \end{cases}$$

$$k^2(\tilde{E}_\mathrm{n}, x) = k^2(x) = 2(\tilde{E}_\mathrm{n})$$

*красным отмечено аналитическое решение

Результаты работы алгоритма

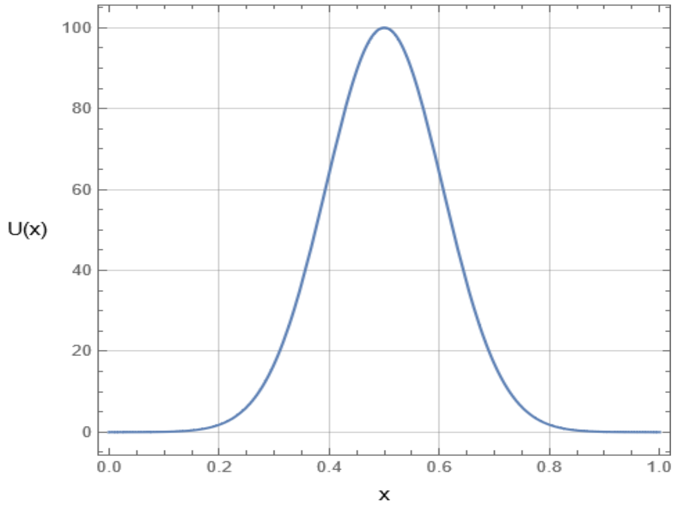


Представление результатов. Симметричный потенциал

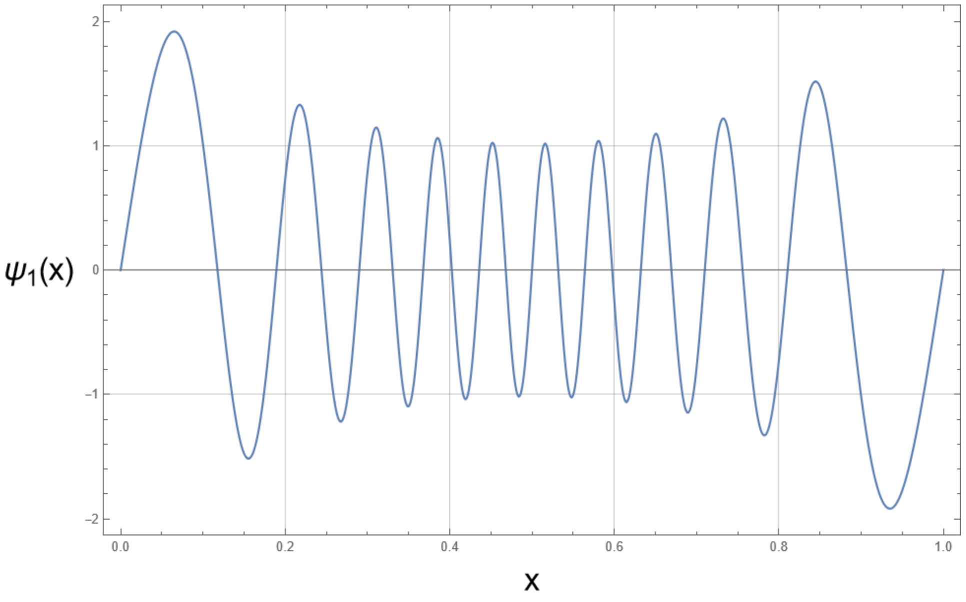
Рассмотрим задачу с симметричным потенциалом

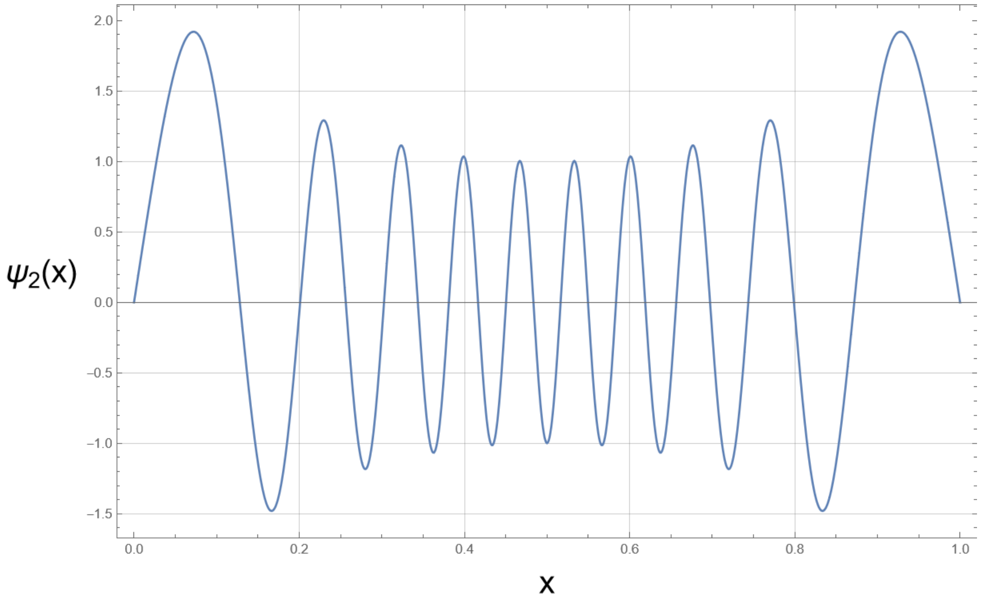
$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ 100\exp(-\frac{(x-0.5)^2}{0.225}), & 0 < x < 1; \\ \infty, & x > 1; \end{cases}$$

Визуальное представление потенциала:



Результаты работы алгоритма



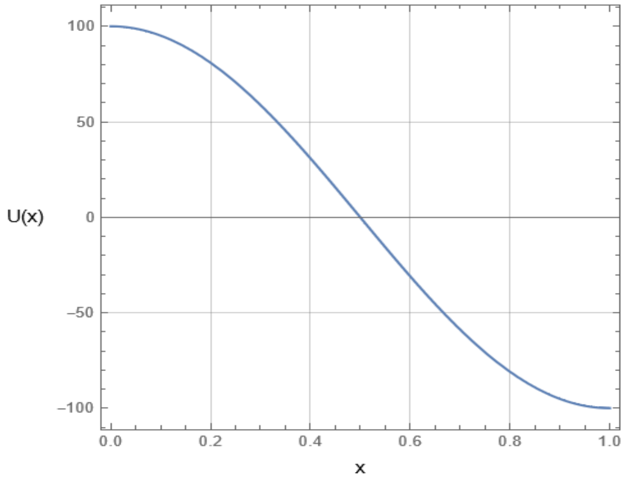


Представление результатов. Асимметричный потенциал

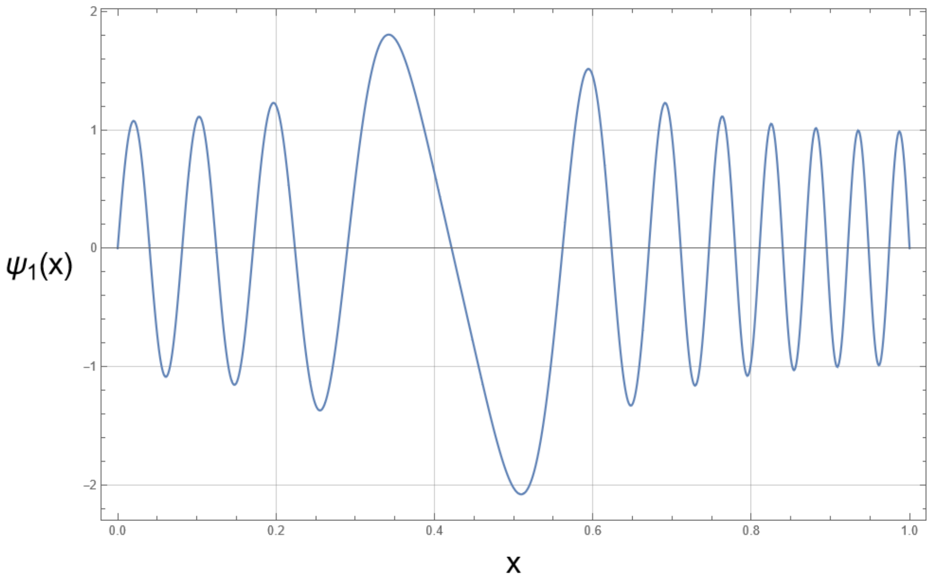
Рассмотрим задачу с асимметричным потенциалом

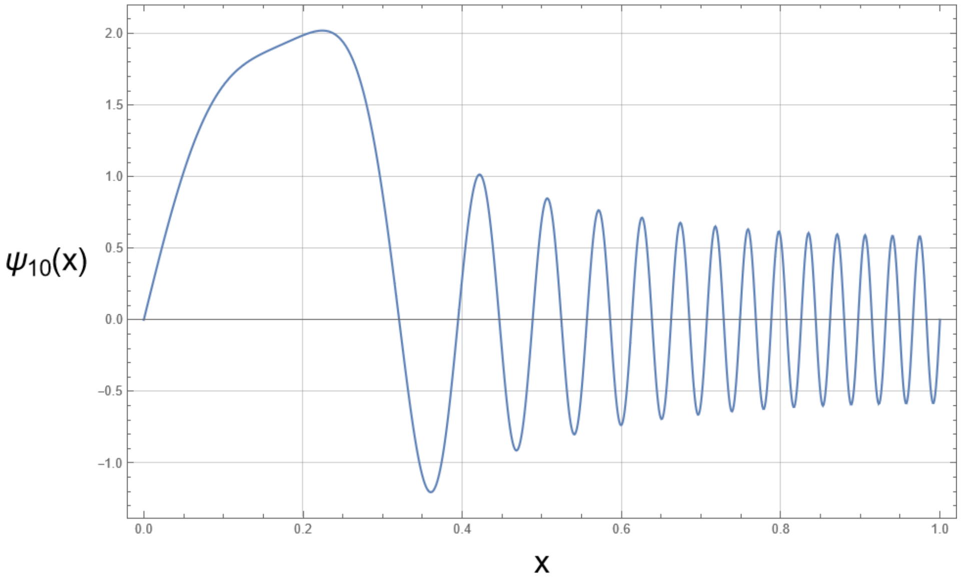
$$U(x) = \begin{cases} \infty, & x < 0; \\ 100\cos(\pi x), & 0 < x < 1; \\ \infty, & x > 1; \end{cases}$$

Визуальное представление потенциала:



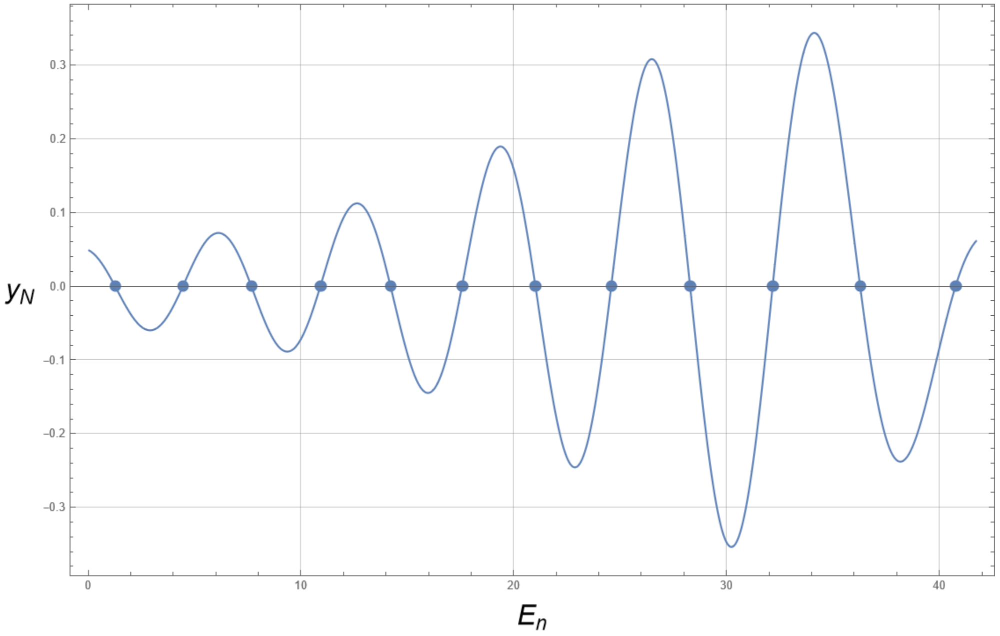
Результаты работы алгоритма



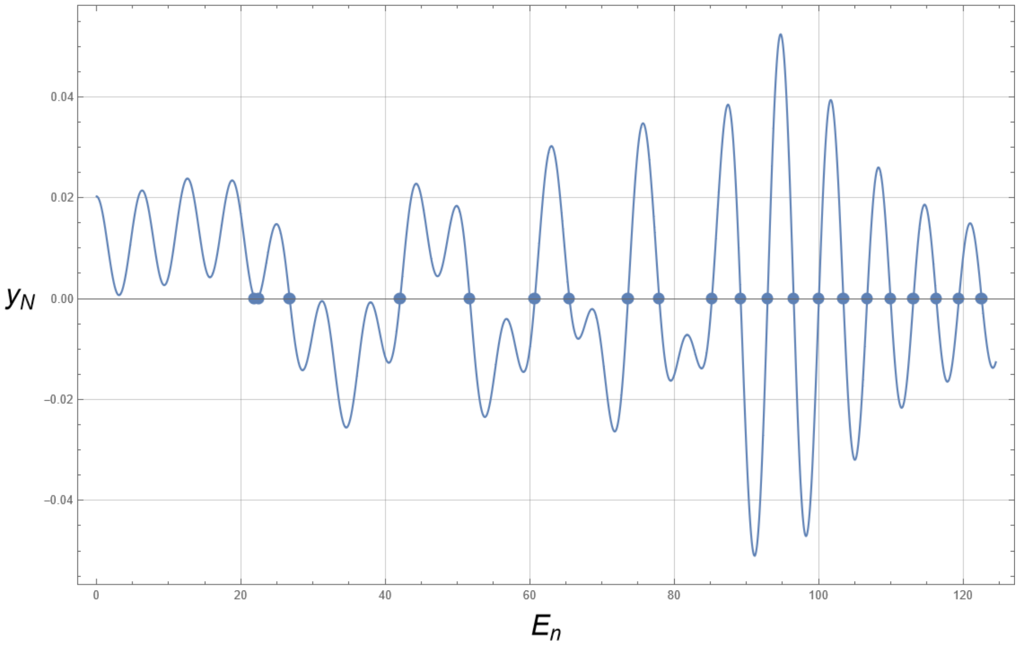


Представление результатов. Визуализация характеристической функции

- Характеристическая функция для симметричного потенциала



- Характеристическая функция для асимметричного потенциала



Результаты работы

По окончании работы были получены следующие результаты:

- Изучен метод численного решения ОДУ второго порядка – метод Нумерова;
- Были найдены численные решения уравнения Шредингера с произвольными потенциалами;
- Проведен анализ и визуализация полученных результатов

Спасибо за внимание.