МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(ФГБОУ ВО «ВГУ»)

Факультет прикладной математики, информатики и механики
Кафедра математического и прикладного анализа

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №1

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА: МЕТОД ПРИСТРЕЛКИ

Направление: 01.03.02м – Прикладная математика и информатика

Профиль: Математические основы и программирование компьютерной графики

Выполнил:
студент 11 группы 2 курса магистратуры
Иванов И.И.

Преподаватель:
доктор физ.-мат. наук, профессор
Тимошенко Ю.К.,

Воронеж 2020

Содержание

1. Цели и задачи работы

Цели работы.

Целями лабораторной работы являются практическое освоение информации, полученной при изучении курса «Компьютерное моделирование в математической физике» по теме «Численное решение стационарного уравнения Шрёдингера», а также развития алгоритмического мышления и приобретения опыта использования знаний и навыков по математике, численным методам и программированию для решения прикладных задач физико–технического характера.

Задачи работы.

Проблема: электрон находится в одномерной потенциальной яме с бесконечными стенками:

$$v(x) = \begin{cases} J_2(x), & x \in (-L, L); \\ \infty, & x \notin (-L, L), \end{cases}$$

где $V_0 = 25$ эВ, $L = 3$ Å, $J_n(x)$ - функция Бесселя, n – целое число.

1) Используя метод пристрелки, найти энергии, нормированные волновые функции и плотности вероятности для основного и 3-го возбужденного состояний. Привести как численные значения энергий, так и построить графики волновых функций и плотностей вероятности.

2) Вычислить для этих состояний квантовомеханические средние $\langle x \rangle$ и $\langle x^2 \rangle$.

2. Одномерное стационарное уравнение Шрёдингера. Математический формализм. Общие свойства решений

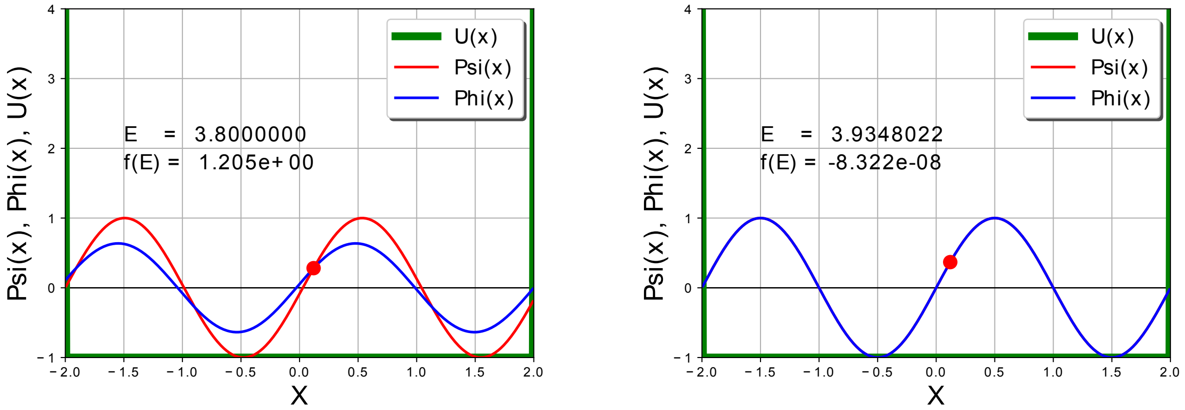
Общие свойства решений одномерного стационарного уравнения Шрёдингера подробно рассмотрены в [1–4]. . . .

3. Метод пристрелки. Алгоритм

...

4. Программная реализация алгоритма

В Приложении 1 представлена программа на языке Python-3 [5–7] численного решения одномерного стационарного уравнения Шредингера для электрона в прямоугольной потенциальной яме с шириной 4 а. е. длины и с бесконечными стенками; дно ямы находится на оси ординат при -1 а. е. энергии. Использовались атомные единицы Хартри (см. [4, 8]). ...



(a) (b)

Рис. 1. Волновые функции, полученные интегрированием «вперед» и «назад» для: а) $e = 3.8$ а. е.; b) $e = 3.9348022$ а. е.

5. Результаты численных экспериментов и их анализ

...

Приложение 1
Компьютерный код

Ниже представлен код программы для вычисления ...

```
"""
Вычисление собственных значений и собственных функций
оператора Гамильтона методом пристрелки.
Одномерная потенциальная яма с бесконечными стенками.
Атомные единицы Хартри.
Версия 1.
"""
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# потенциальная функция, рис.3
# (на рис.3 "a" соответствует "L")
def U(x):
return float(U0 if abs(x) < L else W)

# функция, ф-ла (13)
def q(e, x):
return 2.0*(e-U(x))

# численное вычисление производной, ф-ла (19)
def deriv(Y, h, m):
return (Y[m-2]-Y[m+2]+8.0*(Y[m+1]-Y[m-1]))/(12.0*h)

# вычисление разности производных в узле сшивки,
# формула (18)
def f_fun(e, r, n):
F = np.array([c*q(e, X[i]) for i in np.arange(n)])
Psi[0] = 0.0
Fi[n-1] = 0.0
Psi[1] = d1
Fi[n-2] = d2
# решение задачи Коши "вперед" методом Нумерова
for i in np.arange(1, n-1, 1):
p1 = 2.0*(1.0 - 5.0*F[i])*Psi[i]
p2 = (1.0 + F[i-1])*Psi[i-1]
Psi[i+1] = (p1 - p2)/(1.0 + F[i+1])
```

```
# решение задачи Коши "назад" методом Нумерова
for i in np.arange(n-2, 0, -1):
f1 = 2.0*(1.0 - 5.0*F[i])*Fi[i]
f2 = (1.0 + F[i+1])*Fi[i+1]
Fi[i-1] = (f1 - f2)/(1.0 + F[i-1])
# поиск максимального по величине элемента Psi
p1 = np.abs(Psi).max()
p2 = np.abs(Psi).min()
big = p1 if p1 > p2 else p2
# масштабирование Psi
Psi[:] = Psi[:]/big
# математическая нормировка Fi для
# достижения равенства F[r]=Psi[r]
coef = Psi[r]/Fi[r]
Fi[:] = coef*Fi[:]
# вычисление f(E) для узла сшивки, формула (18)
f = deriv(Psi, h, r) - deriv(Fi, h, r)
return f

# задание отрезка [A, B] (края ямы)
L = 2.0
A = -L
B = +L
# кол-во узлов сетки на [A, B]
n = 501
# шаг сетки
h = (B-A)/(n-1)
# константа для использование в методе Нумерова
c = h**2/12.0
# минимальное значение потенциальной функции
U0 = -1.0
# максимальное значение потенциальной функции на графике
W = 4.0

Psi = np.zeros(n)
Fi = np.zeros(n)
F = np.zeros(n)
Psi2 = np.zeros(n)
X = np.linspace(A, B, n)

# номер узла сшивки
```

```
r = (n-1)//2+15

d1 = 1.e-9
d2 = d1

# ввод пристрелочного значения энергии
e = float(input("Energy = "))
print("e =", e)
f = f_fun(e, r, n)
print("f =", f)

Upot = np.array([U(X[i]) for i in np.arange(n)])
# построение графика
plt.axis([A, B, U0, W])
Zero = np.zeros(n, dtype=float)
plt.plot(X, Zero, 'k-', linewidth=1.0)
plt.plot(X, Upot, 'g-',
linewidth=6.0,  label="U(x)")
plt.plot(X[1:n-1], Psi[1:n-1], 'r-',
linewidth=2.0, label="Psi(x)")
plt.plot(X[1:n-1], Fi[1:n-1], 'b-',
linewidth=2.0, label="Phi(x)")

plt.xlabel("X", fontsize=20, color="k")
plt.ylabel("Psi(x), Phi(x), U(x)",
fontsize=20, color="k")
plt.grid(True)
plt.legend(fontsize=16, shadow=True,
fancybox=True)
plt.plot([X[r]], [Psi[r]], color='red',
marker='o', markersize=10)
string1 = "E    = " + str(e)
string2 = "f(E) = " + str(f)
plt.text(-1.5, 2.1, string1,
fontsize=16, color='black')
plt.text(-1.5, 1.7, string2,
fontsize=16, color="black")
# сохранение графика в файл
plt.savefig('Schrodinger-1M.pdf', dpi=300)
# вывод графика в окно
plt.show()
```

Список литературы

1. Давыдов А. С. Квантовая механика. СПб.: БХВ-Петербург, 2011. 704 с.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматлит, 2004. 800 с.
3. Дирак П. А. М. Принципы квантовой механики. М.: ЕЁ Медиа, 2012. 480 с.
4. Тимошенко Ю. К. Численное решение стационарного уравнения Шрёдингера: метод пристрелки. Учебное пособие. Воронеж: Научная книга, 2019. 35 с.
5. Бизли Д. Python. Подробный справочник. СПб.: Символ-Плюс, 2010. 864 с.
6. Марчук А. Х. Введение в Python для студентов-астрономов. Методическое пособие. СПб.: СПбГУ, 2016. 49 с.
7. Доля П. Г. Введение в научный Python. Харьков: ХНУ, 2016. 265 с.
8. Сена Л. А. Единицы физических величин и их размерности. М.: Наука, 1977. 334 с.