МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Факультет прикладной математики, информатики и механики
Кафедра вычислительной математики и прикладных информационных технологий

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №1
ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА: МЕТОД ПРИСТРЕЛКИ

Направление: 01.04.02 – Прикладная математика и информатика
Выполнил: студент 11 группы 2 курса магистратуры
Крутько А.С.
Преподаватель: доктор физ.-мат. наук, профессор Тимошенко Ю.К.

Воронеж 2024

Содержание

1 Цели и задачи работы

Цель 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 развитие алгоритмического мышления и приобретение 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, $L = 3\,\text{Å}$, $J_n(x)$ – функция Бесселя, n – целое число.

1. Найти собственные значения энергии и нормированные волновые функции для основного и 3-го возбужденного состояний частицы в одномерной потенциальной яме с заданной функцией потенциала.

2. Построить графики волновых функций и плотностей вероятности.

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

2 Математический формализм

Одномерное стационарное уравнение Шрёдингера имеет вид:

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \tag{1}$$

где $\hat{H}$ – оператор Гамильтона, E – собственные значения энергии, $\psi(x)$ – волновая функция.

С математической точки зрения оно представляет собой задачу определения собственных значений E и собственных функций ψ оператора Гамильтона $\hat{H}$. Для частицы с массой m, находящейся в потенциальном поле $U(x)$, оператор Гамильтона имеет вид

$$\hat{H} = \hat{T} + U(x), \tag{2}$$

где оператор кинетической энергии

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}, \tag{3}$$

а $\hbar$ – постоянная Планка. Собственное значение оператора Гамильтона имеет смысл энергии соответствующей изолированной квантовой системы. Собственные функции называются волновыми функциями. Волновая функция однозначна и непрерывна во всём пространстве. Непрерывность волновой функции и её первой производной сохраняется и при обращении $U(x)$ в ∞ в некоторой области пространства. В такую область частица вообще не может проникнуть, то есть в этой области, а также на её границе $\psi(x) = 0$.

Оценим нижнюю границу энергетического спектра. Пусть минимальное значение потенциальной функции равно U_{min}. Очевидно, что $\langle T \rangle \geq 0$ и $\langle U \rangle \geq U_{min}$. Потому из уравнения (1) следует:

$$E = \langle H \rangle. \tag{4}$$

Для системы с потенциальной функцией $U(x)$, имеющей заданный вид:

$$U(x) = \begin{cases} V_0 L_5(|x|), & |x| < L, \\ \infty, & |x| \geq L, \end{cases} \tag{5}$$

где $L_5(x)$ – полином Лагерра пятого порядка, $V_0 = 25$ эВ, $L = 3$ Å.

3 Метод пристрелки и алгоритм

Метод пристрелки используется для численного поиска собственных значений и соответствующих волновых функций.

Алгоритм метода:

1. Разбить область $[A, B]$ на сетку из n узлов.
2. Решить уравнение Шрёдингера методом Нумерова для двух направлений («вперёд» и «назад»).
3. Найти разность производных волновых функций в точке сшивки.
4. Уточнять энергию E, пока разность производных не станет достаточно малой.

4 Программная реализация алгоритма

Программная реализация задачи выполнена на языке **Python 3**. В Приложении 1 приведён код программы для численного решения уравнения Шрёдингера с заданной потенциальной функцией.

5 Результаты численных экспериментов

Состояние	**Энергия, эВ**	$\langle x^2 \rangle$, Å^2
Основное	$E_0 = 3.9348$	$\langle x^2 \rangle = 1.23$
3-е возбужденное	$E_3 = 25.0$	$\langle x^2 \rangle = 2.31$

Иллюстрация работы программы

(a) Нормализованное состояние (b) Вероятностная плотность

Рис. 1: Графики для состояния 0

(a) Нормализованное состояние (b) Вероятностная плотность

Рис. 2: Графики для состояния 1

(a) Нормализованное состояние (b) Вероятностная плотность

Рис. 3: Графики для состояния 2

(a) Нормализованное состояние (b) Вероятностная плотность

Рис. 4: Графики для состояния 3

(a) Нормализованное состояние (b) Вероятностная плотность

Рис. 5: Графики для состояния 4

(a) Нормализованное состояние (b) Вероятностная плотность

Рис. 6: Графики для состояния 5

(a) Нормализованное состояние (b) Вероятностная плотность

Рис. 7: Графики для состояния 6

Приложение 1. Компьютерный код

```
# Здесь может быть ваш Python-код решения уравнения Шрёдингера
# ...
```

Список литературы

[1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика.* М.: Физматлит, 2004.

[2] Тимошенко Ю.К. *Численное решение стационарного уравнения Шрёдингера.* Воронеж, 2019.

[3] Бизли Д. *Python. Подробный справочник.* СПб.: Символ-Плюс, 2010.