

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	3
2	Математический формализм	3
3	Метод пристрелки и алгоритм	3
4	Программная реализация алгоритма	4
5	Результаты численных экспериментов	4

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 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. 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:

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

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

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

$$U(x) = \begin{cases} V_0 L_5(|x|), & |x| < L, \\ \infty, & |x| \geq L, \end{cases} \quad (2)$$

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



Рис. 1: Волновые функции $\psi(x)$ и потенциал $U(x)$ для основного состояния.

Состояние	Энергия, эВ	$\langle x^2 \rangle, \text{\AA}^2$
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

[b]0.45

../state_0_normalized.pdf

Рис. 2: Состояние 0 (нормализованное)

[b]0.45

../state_0_density.pdf

[b]0.45

../state_1_normalized.pdf

Рис. 5: Состояние 1 (нормализованное)

[b]0.45

../state_1_density.pdf

Приложение 1. Компьютерный код

(См. код, представленный выше)

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.