ШАТЕНОВА Н, ТУРАПОВА А., ИМАНАЛИЕВ У.
lib.knu@mail.ru

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Кыргызский национальный университет им. Ж.Баласагына, Бишкек, ул. Фрунзе, 547

Только в очень редких случаях уравнение Шредингера допускает аналитическое решение, выражаемое через ортогональные полиномы или бесконечные ряды. В частности одномерное уравнение Шредингера имеет аналитическое решение для бесконечно глубокой потенциальной ямы и для гармонического осциллятора. Для потенциала общего вида уравнение Шредингера приходится анализировать численно. Задача численного анализа уравнения Шредингера осложняется тем, что эта задача является задачей на собственные значения и при решении этой задачи необходимо численно определять значение уровней энергии при которых имеется нетривиальное ограниченное решение уравнения Шредингера.

Одномерное стационарное уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}\left(E-U(x)\right)\cdot\psi=0. \qquad (0.1)$$

Для однозначного решения уравнения Шредингера необходимо задать систему граничных условий. Система граничных условий в общем случае сводится к требованию однозначности и непрерывности волновой функции и ее первых производных, а также выполнение условий нормировки. Последнее условие сводится к условию ограниченности волновой функции по модулю.

В некоторых задачах квантовой механики потенциальную энергию удобно аппроксимировать разрывной функцией. В точке разрыва потенциальной энергии волновая функция и ее первые производные должны оставаться непрерывными. Производная от волновой функции испытывает скачок лишь на поверхности бесконечно большого разрыва потенциальной энергии.

Реализацию процедуры численного анализа уравнения Шредингера рассмотрим на конкретном примере движения электрона в потенциальной яме вида:

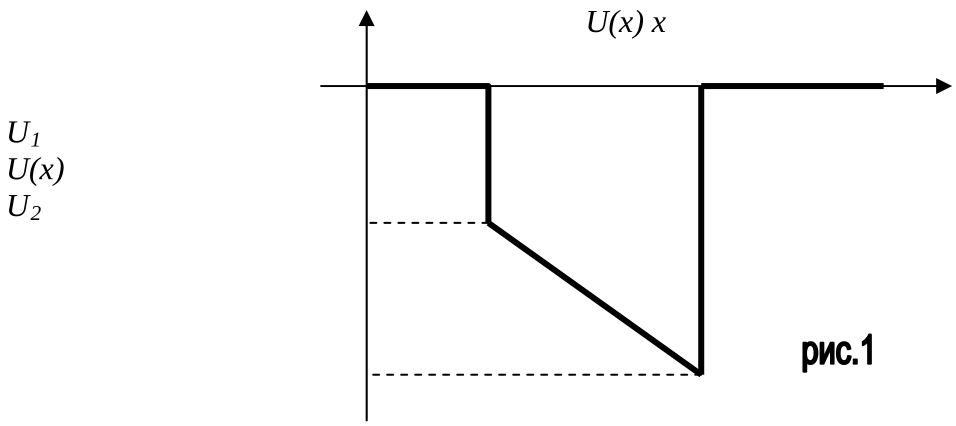


рис.1

для которого не имеется аналитического решения. Подставляя численные значения для массы электрона и постоянной Планка, переходя к единицам измерения координаты в ангстремах, а энергии в электронвольтах запишем уравнение Шредингера в виде:

$$\psi''+0,26\left(E-U(x)\right)\cdot\psi=0 \qquad (0.2)$$

Электрон будет находится внутри потенциальной ямы на некоторых выделенных уровнях энергии E_i которые необходимо определить из уравнения Шредингера и граничных условий, которые определяются из следующих соображений.

Волновая функция электрона вне ямы должна экспоненциально затухать. То есть на границе $x=x_1$ имеем

$$\psi = e^{-\alpha(x_1 - x)};$$
$$\psi' = \alpha \cdot e^{-\alpha(x_1 - x)};$$
$$\psi'' = \alpha^2 \cdot e^{-\alpha(x_1 - x)}; \qquad (0.3)$$

Подставляя в уравнение Шредингера, получим

$$\alpha^2 \cdot e^{-\alpha(x_1 - x)} = -0,26\left(E - U(x)\right) \cdot e^{-\alpha(x_1 - x)} \qquad (0.4)$$

Откуда

$$\alpha_1^{\,2} = 0,26 \cdot \left(U(x_1) - E\right) \qquad (0.5)$$

Аналогично на границе $x = x_2$ имеем

$$\alpha_2^{\,2} = 0,26 \cdot \left(U\left(x_2\right) - E\right) \qquad (0.6)$$

Используя это условие, находим собственные значения, то есть уровни энергии E_i.

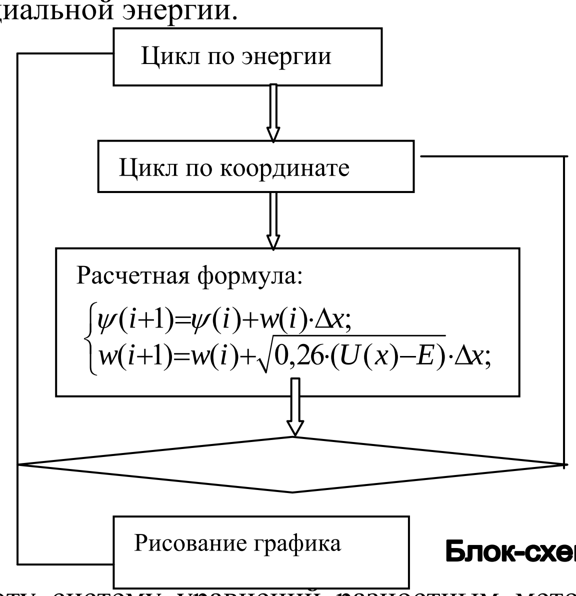
Составим блок-схему численного анализа уравнения Шредингера. Для этого представим уравнение Шредингера, которое является дифференциальным уравнение второго порядка в виде системы дифференциальных уравнений первого порядка:

$$\begin{cases} \psi' = w(x); \\ w' = 0,26 \cdot (U(x) - E)). \end{cases} \qquad (0.7)$$

с начальными условиями в точке x_1

$$\begin{cases} \psi(x_1) = 1; \\ w(x_1) = \alpha_1 = \sqrt{0.26 \cdot \left(U(x_1) - E\right)} \end{cases} \qquad (0.8)$$

и выбираем некоторое значение энергии E выше которого будем определять уровни энергии. Естественно, что это значение энергии должно лежать выше минимального значения потенциальной энергии.



Блок-схема программы

Решаем эту систему уравнений разностным методом. Для уменьшения времени счета выбирался простейший метод Эйлера. Решение производим до точки x_2, в этой точке находим значения $\psi(x_2)$ и $w(x_2)$.

После этого проводим проверку условия

$$\left| w(x_2) - \alpha_2 \cdot \psi(x_2) \right| \le \delta \qquad (0.9)$$

где δ задает точность определения численного значения уровня энергии E. Чем меньше δ, тем точнее определяется уровень энергии. Если это условие не выполняется, то к энергии E добавляется приращение ΔE и процесс повторяется до выполнения условия. При выполнении условия рисуется график волновой функции, к энергии добавляется в два раза большее приращение и начинается поиск следующего уровня энергии.

Таким образом, расчетная схема численного решения уравнения Шредингера имеет вид

$$\begin{cases} \psi(i+1) = \psi(i) + w(i)\cdot\Delta x; \\ w(i+1) = w(i) + \sqrt{0,26\cdot(U(x)-E)}\cdot\Delta x; \end{cases} \qquad (0.10)$$

Ниже приводится сама программ на языке программирования MATLAB и результаты расчета для некоторых случаев.

```
x1=0;
x2=1;
U1=-500;
U2=-1500;
k=(U2-U1)/(x2-x1)
b= U1 - (U2-U1)*x1/(x2-x1)
dE= -U2/1000
dx=0.01
E0 = U1 + dE
alfa1 = (0.26*(E0-U1))^(1/2)
delta = alfa1/10
axes('color',[1 1 1],'xlim',[x1-1 x2+1],'ylim',[2*U2 2*abs(U2)]);
X = [-1 x1]; Y = [0 0]; line(X,Y,'color',[0 0 0],'linewidth',[3]);
X = [x2 x2+1]; Y = [0 0]; line(X,Y,'color',[0 0 0],'linewidth',[3]);
X = [x1 x1]; Y = [0 U1]; line(X,Y,'color',[0 0 0],'linewidth',[3]);
X = [x1 x2]; Y = [U1 U2]; line(X,Y,'color',[0 0 0],'linewidth',[3]);
X = [x2 x2]; Y = [U2 0]; line(X,Y,'color',[0 0 0],'linewidth',[3]);
for(E=E0:dE:0)
 i=1;
 psi(i)=1;
 w(i) = (0.26*(E0-U1))^(1/2);
 for(x=x1:dx:x2)
 XX(i+1) = x;
 U = k*x+b;
 alfa = (0.26*(E-U))^(1/2);
 psi(i+1) = psi(i) + w(i)*dx;
 w(i+1) = w(i) - (alfa^2)*psi(i)*dx;
```

```
i = i+1;
end
if(abs(w(i)-alfa*psi(i)) <= alfa/10)
Psi = E + 50*psi;
line(XX,Psi);
E
End
```

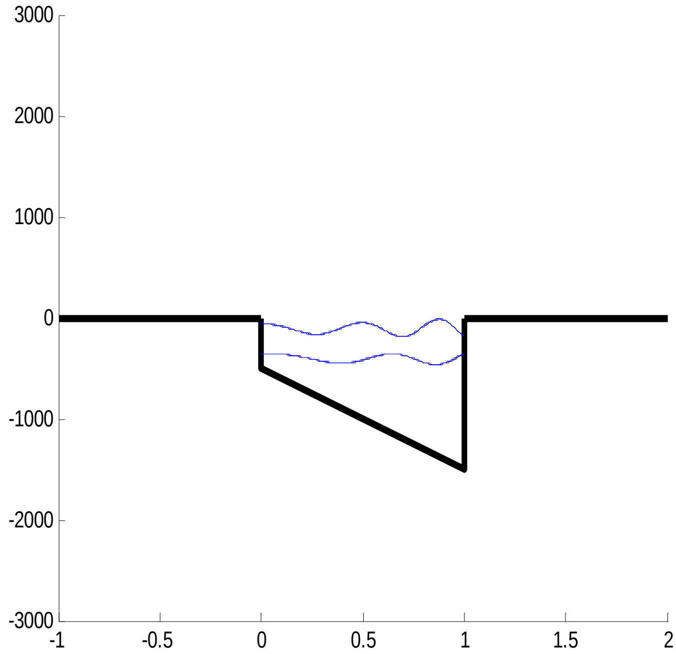


рис.2 Расчет для потенциальной ямы с глубиной 2000 эВ

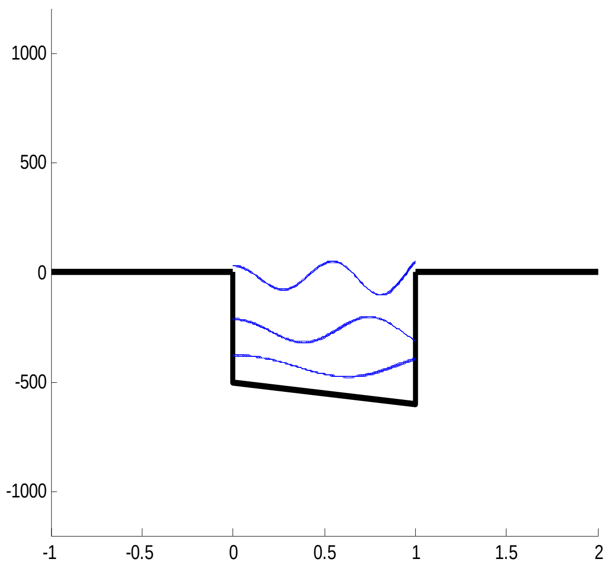


рис.3 Расчет для потенциальной ямы с глубиной 5000 эВ

Литература

1. П.В.Елютин, В.Д.Кривченков Квантовая механика. М., «Наука», 1976г., 336 с.