А. В. Павленко (ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)
Науч. рук. **Ю. А. Гришечкин,** канд. физ.-мат. наук, доцент

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В ИМПУЛЬСНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ ДЛЯ ПОТЕНЦИАЛА ГАУССА

Одной из основных задач квантовой механики является определение спектра энергий связанных состояний частицы путем решения уравнения Шредингера с заданным потенциалом. Одномерное уравнение Шредингера в импульсном представлении имеет вид [1]

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E\right)\psi(k) = -\int_{-\infty}^{\infty} W\left(k - k'\right)\psi(k')\,\mathrm{d}k', \qquad (1)$$

где m – масса частицы, $\hbar$ – приведенная постоянная Планка, k – импульс частицы, $\psi(k)$ – волновая функция, $W(k-k')$ – потенциал в импульсном представлении, $E<0$ – энергия частицы.

Для моделирования короткодействующих взаимодействий широко используется уравнение Шредингера (1) с потенциалом Гаусса

$$V\left(x\right) = -V_0 \exp(-a x^2), \qquad (2)$$

где $V_0 > 0$ – глубина потенциала, $a > 0$ – параметр, характеризующий ширину потенциала, x – координата. Связь потенциала в импульсном представлении с потенциалом в координатном представлении имеет вид

$$W\left(k\right) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} dx V\left(x\right)\exp\left(-ikx\right). \qquad (3)$$

Подставив выражение (2) в интеграл (3) и вычислив его, получим

$$W\left(k\right) = -V_0 \frac{1}{2\sqrt{\pi a}} \exp\left(-\frac{k^2}{4a}\right). \qquad (4)$$

После подстановки (4) в уравнение (1), замены переменной и энергии по формулам

$$k = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}\rho, \quad k' = \frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}\rho', \quad \mathrm{E} = -\mathrm{V}_0\,\lambda, \qquad (5)$$

мы получим уравнение Шредингера в безразмерных переменных

$$\left(\rho^2 + \lambda\right)\psi(\rho) = \frac{1}{2\sqrt{\pi q}}\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\left(\rho - \rho'\right)^2}{4q}\right)\psi(\rho')\,\mathrm{d}\rho', \qquad (6)$$

где $q = a\hbar^2 / (2mV_0)$ – постоянная величина, ρ и ρ' – безразмерные переменные, $\lambda > 0$ – постоянная безразмерная величина. Заменив в уравнении (6) интеграл суммой по квадратурной формуле прямоугольников [2], мы сведем интегральное уравнения к однородной линейной алгебраической системе уравнений

$$K\psi = \lambda\psi, \tag{7}$$

где K – матрица системы уравнений, ψ – вектор, компоненты которого являются значениями волновой функции в узловых точках квадратурной формулы. Величины λ для первых четырех состояний, найденные путем решения задачи на собственные значения для системы уравнений (6) в случае различного числа шагов N и для $q = 0{,}04$ приведены в Таблице 1.

Таблица 1 –Собственные значения λ

n	*N*		
	50	100	200
1	0,8150910700307	0,8150904673583	0,8150901345016
2	0,4785876389933	0,4785833413559	0,4785809800833
3	0,2143736823237	0,2143613341554	0,2143545820893
4	0,0404520667342	0,0404379094671	0,0404301947059

Графики волновых функций первых трех состояний изображены на рисунке 1.

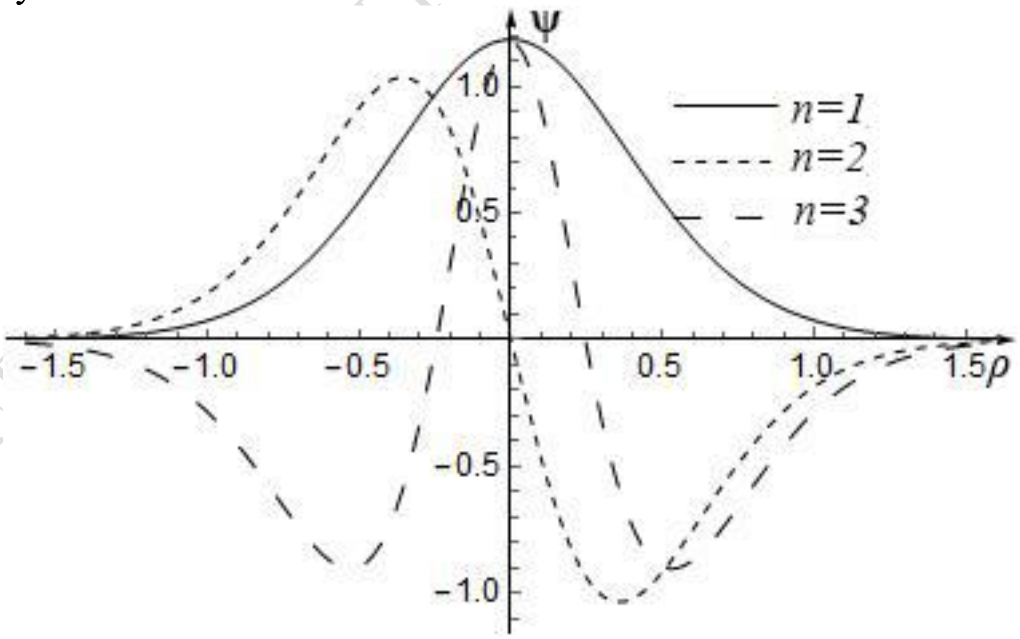

Рисунок 1 – Волновые функции первых трех состояний

На рисунке 1 видно, что количество нулей волновой функции n-ого состояния равно $n-1$.

В данной работе найдены численные решения уравнения Шредингера в импульсном представлении с потенциалом Гаусса в одномерном случае. Был получен энергетический спектр и волновые функции в некоторых частных случаях.

Литература

1. Флюгге, З. Задачи по квантовой механике: в 2 т. / З. Флюгге. – 3-изд. – Москва: ЛКИ, 2010. – Т. 1. – 344 с.

2. Калиткин, Н. Н. Численные методы / Н. Н. Калиткин. – М.: Наука, 1978. – 512 с.