

Д. С. Трофимович, А. В. Павленко
(ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)
Науч. рук. **В. Н. Капшай**, канд. физ.-мат. наук, доцент

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА С ПОТЕНЦИАЛОМ ГАУССОВОГО ТИПА

Одной из основных задач квантовой механики является определение спектра энергий связанных состояний частицы в потенциальном поле. Данную задачу можно решить с использованием уравнения Шрёдингера. В статьях [1–2] предложены приближенные методы для решения трехмерного уравнения Шрёдингера (как в координатном, так и в импульсном представлении) для потенциала Гаусса. В работе [3] рассмотрено решение трехмерного уравнения Шрёдингера для потенциала Гаусса, с помощью модифицированного ВКБ-приближения. В работе [4] рассматривалось численное решение одномерного интегрального уравнения Шрёдингера в импульсном представлении с этим же потенциалом.

Одномерное уравнение Шрёдингера имеет вид [5]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + [E - V(x)] \psi(x) = 0, \quad (1)$$

где $\psi(x)$ – волновая функция;

$\hbar$ – приведенная постоянная Планка;

m – масса частицы;

E – энергия частицы;

x – координата частицы;

$V(x)$ – потенциал.

Волновая функция нормирована в соответствии с условием

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1. \quad (2)$$

В настоящей работе получим решение уравнения (1) с учетом одномерного потенциала гауссова типа

$$V(x) = -V_0 x^2 \exp(-ax^2), \quad (3)$$

где $V_0 > 0$ – константа характеризующая «глубину» потенциала (3);

$a > 0$ – параметр, характеризующий «ширину» потенциала.

Дифференциальное уравнение (1) при использовании потенциала (3) не имеет точного решения. Поэтому поставленную задачу будем решать численно.

Перейдем в (1) к безразмерным переменным, для чего осуществим замену энергии, координаты и волновой функции, соответственно, по формулам:

$$E = V_0 \lambda \sigma^2, \quad x = y \sigma, \quad \psi(x) = \frac{\psi(y)}{\sqrt{\sigma}}, \quad q = a \sigma^2, \quad \sigma = \left(\frac{\hbar^2}{2mV_0} \right)^{1/4}, \quad (4)$$

где $\lambda < 0$ и q – безразмерные константы;

$\psi(y)$ – безразмерная функция.

Подставляя (3) и (4) в (1), получим одномерное уравнение Шрёдингера в безразмерных переменных:

$$\frac{d^2}{dy^2} \psi(y) - [\lambda + y^2 \exp(-qy^2)] \psi(y) = 0. \quad (5)$$

Для численного решения дифференциального уравнения (5) будем использовать метод аппроксимации, основанный на разбиении оси y на сетку узлов. В этом методе интервал $y \in (-b, b)$ разбивается на равномерные части. Размер шага разбиения h определяется по формуле $h = 2b/N$ где N – число интервалов, на которые делится отрезок $(-b, b)$. Тогда узлы сетки располагаются по координатам, $y_{i+1} = y_i + h$, где $y_0 = -b, y_N = b$, а $i = 0, 1, 2, \dots, N-1$. Для вычисления второй производной функции в произвольной точке y воспользуемся численной формулой [6, ст. 82]:

$$\frac{d^2}{dy^2} \psi(y) = \frac{-\psi(y+2h) + 16\psi(y+h) - 30\psi(y) + 16\psi(y-h) - \psi(y-2h)}{12h^2} + O(h^4). \quad (6)$$

Подставим (6) в (5), воспользуемся свойством дельта-символа Кронекера $\delta_{i,j}$ и свернем сумму по повторяющимся индексам, в результате сведем задачу о решении дифференциального уравнения к решению однородной линейной алгебраической системы уравнений

$$\sum_{j=1}^N M_{ij} y_j = \lambda y_i, \quad (7)$$

$$M_{ij} = \frac{1}{12h^2} (-\delta_{i+2,j} + 16\delta_{i+1,j} - 30\delta_{i,j} + 16\delta_{i-1,j} - \delta_{i-2,j}) - y_i^2 \exp(-qy_i^2) \delta_{i,j}. \quad (8)$$

Решая полученную матричную задачу (7), (8) на собственные значения при различных значениях числа интервалов N получим численное значение величины λ для четырех состояний приведенных в таблице 1.

Таблица 1 – Собственные значения λ , полученные при $q = 0,15$

n	N		
	50	100	200
1	-1,710520	-1,709630	-1,709570
2	-1,683690	-1,682730	-1,682670
3	-0,528887	-0,526364	-0,526196
4	-0,379405	-0,376320	-0,376115

В результате анализа решений, полученных при различных значениях безразмерного параметра q , нами обнаружено, что с ростом q количество связанных состояний уменьшается. Из формул (4) следует, что величины q и a линейно зависимы, и при увеличении q «ширина» потенциала (3) уменьшается.

На рисунке 1 приведены графики волновых функций $\psi(y)$ для состояний, которым соответствуют значения $n=1, 2, 3$.

Анализируя графические изображения, приведенные на рисунке 1, заметим, что количество нулей волновой функции, соответствующей n -му состоянию, равно $n-1$.

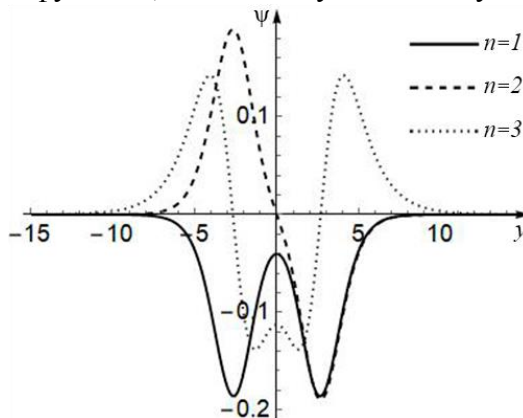


Рисунок 1 – Графики волновых функций $\psi(y)$

Таким образом, в данной работе получено численное решение одномерного дифференциального уравнения Шрёдингера с потенциалом гауссова типа, в частных случаях определены волновые функции и спектр энергий частицы для связанных состояний.

Литература

1. Гришечкин, Ю. А. Об одном приближенном аналитическом методе решения уравнения Шредингера с гауссовым потенциалом / Ю. А. Гришечкин, А. В. Павленко, В. Н. Капшай // Проблемы физики, математики и техники. – 2019. – № 4 (41). – С. 7–10.
2. Гришечкин, Ю. А. Приближенный аналитический метод решения уравнения Шредингера с гауссовым потенциалом в импульсном представлении / Ю. А. Гришечкин, А. В. Павленко // Проблемы физики, математики и техники. – 2020. – № 3 (44). – С. 18–21.
3. Кудряшов, В. В. Решение радиального уравнения Шредингера для потенциала Гаусса в модифицированном ВКБ-приближении / В. В. Кудряшов, А. В. Баран // Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2013. – Т. 57. – № 5. – С. 43–48.
4. Павленко, А. В. Численное решение одномерного уравнения Шредингера в импульсном представлении для потенциала Гаусса / А. В. Павленко, Ю. А. Гришечкин // Актуальные вопросы физики и техники: материалы IX Республиканской конференции студентов, магистрантов, Гомель. – 2020. – Ч. 2. – С. 32–34.
5. Давыдов, А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. – 3-е изд. – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 699 с.
6. Бахвалов, Н. С. Численные методы / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2003. – 632 с.