

Е. А. Дей

г. Гомель, ГГУ им. Ф. Скорины

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В БАЗИСЕ ЭРМИТОВЫХ КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

В работе выполнена программная реализация и исследована вычислительная эффективность метода конечных элементов в подходе Галеркина с использованием эрмитовых конечных элементов высших порядков аппроксимации для численного решения одномерного и радиального уравнений Шредингера для связанных состояний. Программная реализация выполнена отдельно в системе Matlab и в системе Mathcad, что позволяет осуществить независимую проверку численных результатов. Показано, что применение эрмитовых конечных элементов более высокого порядка позволяет получать численное решение стационарного уравнения Шредингера на персональных компьютерах с высокой точностью.

1. Расчетные формулы метода конечных элементов при решении уравнения Шредингера. Численное решение одномерного уравнения Шредингера [1]

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi(x) = \varepsilon\psi(x) \quad (1)$$

находилось в области [a; b], которая разбивалась на E равных конечных элементов заданного типа.

Функции формы эрмитовых конечных элементов [2; 3] являются полиномами, коэффициенты которых обеспечивают выполнение непрерывности функции и ее первых производных до порядка (D-1) в узлах. В одномерном случае при выборе U узлов на каждом элементе это означает, что искомую функцию можно представить в виде суммы

$$\psi_{(e)}(x) = \sum_{k=0}^{U-1} \sum_{\alpha=0}^{D-1} \psi_k^{(\alpha)} N_{D-k+\alpha}(x) = \sum_{j=0}^{U \cdot D - 1} \varphi_j N_j(x). \quad (2)$$

Производные эрмитовых базисных функций равны единице в узлах с таким же номером и равны нулю в остальных узлах

$$N_{D-k+\alpha}^{(\alpha)}(x_l) = \delta_{kl}; \quad k, l = 0..U-1; \quad \alpha = 0..D-1. \quad (3)$$

Каждая функция формы является полиномом порядка s=U·D-1, коэффициенты полиномов находятся на основании условий (3).

Для получения системы расчетных соотношений выражение для искомой волновой функции в виде суммы по всем конечным элементам

$$\psi(x) = \sum_{e=1}^E \psi_{(e)}(x) = \sum_{j=0}^n \varphi_j N_j(x) \quad (4)$$

подставим в уравнение (1). Здесь $n = E \cdot D \cdot (U - 1) + D$ – общее число неизвестных.

После выполнения стандартного для метода Галеркина умножения на весовые (они же – базисные) функции (3) и перехода к слабой формулировке метода взвешенных невязок получаем обобщенную задачу на собственные значения

$$\sum_{j=0}^n A_{i,j} \varphi_j = \varepsilon \sum_{j=1}^n C_{i,j} \varphi_j, \quad A\varphi = \varepsilon C\varphi, \quad (5)$$

где матрицы A и C вычисляются суммированием матриц по конечным элементам

$$A = \sum_{e=1}^E A^{(e)}; \quad C = \sum_{e=1}^E C^{(e)}, \quad (6)$$

$$A_{i,j}^{(e)} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_{e-1}}^{x_e} [N_i'(x)N_j'(x) + N_i(x)V(x)N_j(x)] dx; \quad C_{i,j}^{(e)} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{x_{e-1}}^{x_e} N_i(x)N_j(x) dx \quad (7)$$

Решение задачи (7) позволяет получить собственные значения энергии ε_n и соответствующие собственные векторы, содержащие значения волновой функции и ее производных в узлах конечных элементов.

2. Результаты численного решения одномерного уравнения Шредингера.

Рассмотрим в качестве тестовой задачи одномерное уравнение Шредингера с потенциалом гармонического осциллятора $V(x) = x^2/2$ с точными значениями $\varepsilon_k^{точн} = k + 1/2$, $k = 0, 1, 2, \dots$ в системе единиц $\hbar=1$, $m=0.5$ [1]. Значения абсолютной погрешности $|\varepsilon_k^{числен} - \varepsilon_k^{точн}|$ первых 50 вычисленных уровней для значений параметров $a=-20$, $b=20$, $hx=0,1$ и различных U, D приведены в таблицах 1-3. В скобках указан порядок полинома s. На рисунке 1 приведен график численной и точной нормированной волновой функции гармонического осциллятора для уровня $k=50$ (область [-12;12], E=80, U=4, D=3, s=11, n=722).

Таблица 1 – Абсолютная погрешность вычисления уровней энергии гармонического осциллятора при D=2

k	$\varepsilon_k^{точн}$	U=2 (s=3)	U=3 (s=5)	U=4 (s=7)	U=5 (s=9)
0	0.5	-1.07e-010	-1.01e-012	3.09e-013	3.73e-013
5	5.5	-7.11e-008	-6.42e-012	-8.35e-014	3.82e-013
10	10.5	-8.48e-007	-2.00e-010	7.32e-013	0.00e+000
15	15.5	-3.85e-006	-1.83e-009	-1.33e-012	-4.21e-013
20	20.5	-1.14e-005	-9.06e-009	-1.17e-011	-6.61e-013
25	25.5	-2.64e-005	-3.15e-008	-5.79e-011	-2.27e-013

30	30.5	-5.25e-005	-8.72e-008	-2.24e-010	-4.33e-013
35	35.5	-9.37e-005	-2.06e-007	-7.11e-010	-3.94e-012
40	40.5	-1.54e-004	-4.34e-007	-1.95e-009	-1.07e-011
45	45.5	-2.40e-004	-8.35e-007	-4.70e-009	-3.58e-011
50	50.5	-3.55e-004	-1.50e-006	-1.26e-008	-9.88e-011

Таблица 2 – Абсолютная погрешность вычисления уровней энергии гармонического осциллятора при D=3

k	$\epsilon_k^{точн}$	U=2 (s=5)	U=3 (s=8)	U=4 (s=11)	U=5 (s=14)
0	0.5	-5.53e-013	-4.39e-013	8.58e-013	2.86e-012
5	5.5	-4.51e-013	-2.12e-012	4.15e-013	-2.44e-012
10	10.5	-7.03e-013	-4.03e-013	1.17e-012	-7.74e-012
15	15.5	-3.63e-012	-2.54e-013	-6.18e-013	-7.85e-012
20	20.5	-1.40e-011	-4.26e-014	-4.33e-013	-9.43e-012
25	25.5	-4.92e-011	-3.20e-013	-1.14e-013	-1.21e-011
30	30.5	-1.45e-010	-3.84e-013	-4.48e-013	-8.87e-012
35	35.5	-3.70e-010	4.97e-014	7.89e-013	-1.36e-011
40	40.5	-8.33e-010	-6.54e-013	-7.46e-013	-1.11e-011
45	45.5	-1.71e-009	-9.95e-014	6.04e-013	-1.50e-011
50	50.5	-3.28e-009	-2.02e-012	-1.98e-012	-1.41e-011

Таблица 3 – Абсолютная погрешность вычисления уровней энергии гармонического осциллятора при D=4

k	$\epsilon_k^{точн}$	U=2 (s=7)	U=3 (s=11)	U=4 (s=15)
0	0.5	8.68e-014	-1.67e-012	-3.87e-012
5	5.5	-1.82e-013	-1.26e-012	-1.24e-012
10	10.5	-1.21e-013	4.65e-013	-6.50e-013
15	15.5	-7.94e-013	1.36e-012	-5.77e-012
20	20.5	-4.41e-013	-2.50e-012	3.90e-012
25	25.5	-8.74e-013	9.95e-014	-7.90e-012
30	30.5	-1.56e-013	-1.07e-012	-4.36e-012
35	35.5	-1.56e-013	-3.77e-013	-8.49e-012
40	40.5	-4.90e-013	-1.51e-012	-1.34e-011
45	45.5	-1.28e-012	-5.47e-013	-1.65e-011
50	50.5	-1.58e-012	-1.61e-012	-2.36e-011

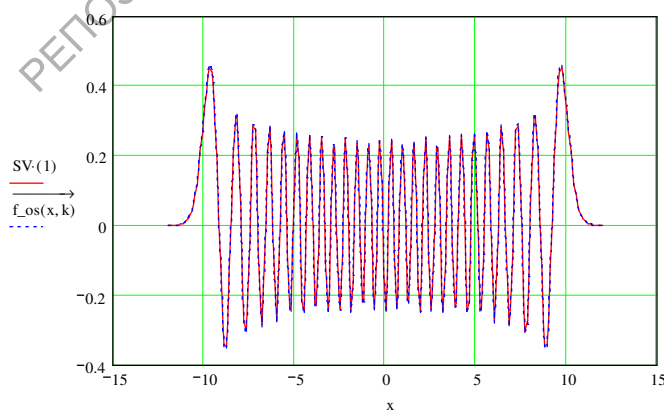


Рисунок 1 – График численной и точной нормированной волновой функции гармонического осциллятора для уровня k=50 (область [-12;12], E=80, U=4, D=3, s=11, n=722)

Результаты показывают, что использование высших порядков полиномов Эрмита позволяет не только получить более точные значения первых уровней, но и существенно расширить диапазон приемлемых численных значений для больших n.

3. Результаты численного решения радиального уравнения Шредингера.

Используем описанный вариант метода конечных элементов для решения радиального уравнения Шредингера [1] для функции $\psi(r) = rR(r)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \psi(r) = E\psi(r), \quad \psi(0) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \psi(r) = 0 \quad (8)$$

с учетом условия нормировки $\int_0^{\infty} |\psi(r)|^2 r^2 dr = 1$. Численное решение выполним в ограниченной области $0 \leq r \leq r_{\max}$, $\psi(r_{\max}) = 0$.

В таблице 4 приведены абсолютные погрешности вычисленных значений энергии для потенциала Вудса-Саксона, в системе единиц $\hbar = 1$, $m=0.5$ имеющего вид [4]

$$V(r) = \frac{a}{1+D} - \frac{acD}{(1+D)^2}, \quad D = e^{c(r-b)}, \quad a = -50, \quad b = 7, \quad c = \frac{5}{3}. \quad (9)$$

Результаты получены при $r_{\max}=16$, $L=0$, $E=80$, $U=3$, $D=3$, $h_e=0,2$, $n=483$. В качестве опорных использовались результаты работы [4], в которых за счет применения весьма сложного численного метода гарантирована точность 10^{-14} .

Таблица 4 – Результаты численного решения радиального уравнения Шредингера с потенциалом Вудса-Саксона

k	Значения E_k , [4]	Вычисленные E_k	Δ
0	49.45778872808258	49.45778872808402	1.43e-12
1	48.14843042000636	48.148430420006065	2.98e-13
2	46.29075395446608	46.29075395446601	7.10e-14
3	43.96831843181423	43.96831843181449	2.55e-13
4	41.23260777218022	41.23260777217989	3.34e-13
5	38.12278509672792	38.12278509672763	2.84e-13
6	34.67231320569966	34.67231320570122	1.56e-12
7	30.91224748790885	30.91224748791057	1.72e-12
8	26.87344891605987	26.87344891605888	9.91e-13
9	22.58860225769321	22.58860225769382	6.11e-13
10	18.09468828212442	18.094688282124473	5.32e-14
11	13.43686904025008	13.436869040248716	1.36e-12
12	8.67608167073655	8.67608167073653	2.13e-14
13	3.90823248120623	3.908232481207072	8.47e-13

В работе на основе ряда выполненных тестовых расчетов исследованы свойства эрмитовых конечных элементов высших порядков при решении уравнения Шредингера. Показано, что использование конечных элементов высших порядков позволяет повысить эффективность решения задач квантовой механики при улучшении точности результатов.

Разработанные программные блоки могут быть использованы для решения широкого класса задач, связанных с расчетом уровней энергии и волновых функций одномерных квантовых систем в стационарных состояниях. Использование эрмитовых конечных элементов является эффективным и экономичным вариантом численного решения уравнения Шредингера. Важным преимуществом является возможность прямого получения в ходе численного решения производной от волновой функции, без дополнительной операции численного дифференцирования. С точки зрения квантовой механики непрерывность первой производной численного решения означает непрерывность тока вероятности в каждом узле расчетной сетки. Предполагается дальнейшее развитие этого подхода в направлении более точного учета поведения волновой функции на бесконечности и оптимизации размеров конечных элементов на неравномерной сетке с целью более полного учета поведения функции в областях ее наиболее резкого изменения.

Список использованных источников

- 1 Давыдов, А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. – М. : Наука, 1973. – 704 с.
- 2 Schweizer, W. Numerical Quantum Dynamics / W. Schweizer. – Kluwer Academic Publishers, 2002. – 267 p.
- 3 Ramdas Ram-Mohan, L. Finite Element and Boundary Element Applications in Quantum Mechanics / L. Ramdas Ram-Mohan. – Oxford University Press, 2002. – 605 p.
- 4 Ledoux, V. High order CP methods for the Numerical Solution of Schrödinger Problems / V. Ledoux, M. Van Daele, G. Vanden Berghe // ICNAAM 2005. International Conference on Numerical Analysis and Applied Mathematics. Extended Abstracts. – P. 858–861.