

Численное решение стационарного уравнения Шредингера обобщенным методом Нумерова

Е.А. ДЕЙ

Предложен новый обобщенный вариант метода Нумерова для численного решения уравнения Шредингера, основанный на использовании конечно-разностных производных высших порядков точности. Выполнено численное исследование эффективности обобщенного метода для различных значений порядка аппроксимации при решении одномерного уравнения Шредингера с потенциалом гармонического осциллятора и радиального уравнения Шредингера с потенциалом Вудса-Саксона. Показано, что практический порядок сходимости результатов соответствует теоретическим оценкам. Сделан вывод о высокой эффективности обобщенного метода Нумерова высших порядков для численного решения задач квантовой механики.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, метод Нумерова, потенциал гармонического осциллятора, потенциал Вудса-Саксона.

A new generalized variant of the Numerov method for numerical solution of the Schrödinger equation is proposed. Generalization is done by use of the high-order finite-difference approximations. The numerical investigation of the efficiency of this method is done for different values of the order of approximation for solution of the one-dimensional Schrödinger equation with oscillator potential and radial Schrödinger equation with Woods-Saxon potential. It is shown that practical convergence rate corresponds with theoretical evaluations. The high efficiency of the high-order generalized Numerov method for numerical solution of quantum mechanical problems is established at a conclusion.

Keywords: Schrödinger equation, Numerov method, oscillator potential, Woods-Saxon potential.

Введение

Уравнение Шредингера составляет теоретическую основу решения многих практически важных задач, число которых увеличивается как с развитием нанотехнологий, так и с разработкой новых теоретических моделей для описания взаимодействия квантовых частиц.

Для численного решения одномерного уравнения Шредингера [1], [2]

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

или радиального уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \chi}{dr^2} + V(r)\chi(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \chi(r) = E\chi(r), \quad \chi(r) = rR(r) \quad (2)$$

разработан целый ряд методов, базирующихся на различных исходных принципах (вариационные, метод конечных элементов, метод граничных элементов, метод конечных разностей и т. д.) [2]–[7].

Одним из эффективных способов повышения точности конечно-разностных расчетов является метод Нумерова [2]–[5], использующий оригинальный прием учета правой части уравнения для повышения точности конечно-разностной аппроксимации дифференциального оператора. Стандартным в методе Нумерова является второй порядок точности для аппроксимации второй производной волновой функции в уравнении Шредингера и получение локальной погрешности четвертого порядка по шагу дискретизации вследствие учета правой части уравнения.

На практике метод Нумерова используется в двух различных формах: а) для реализации поочередного вычисления собственных значений методом пристрелки; б) для получения матричной задачи на собственные значения и приближенного расчета сразу большого числа энергетических уровней.

В данной работе матричный вариант метода Нумерова обобщен для произвольного четного порядка конечно-разностной аппроксимации второй производной. Получены формулы для коэффициентов метода произвольного четного порядка P , выполнены тестовые расчеты для порядков $P = 2..12$. Исследованы вычислительные свойства метода в зависимости от числа используемых точек и порядка, выполнено сравнение результатов с другими методами, сформулированы соответствующие выводы.

Обобщенные соотношения Нумерова для решения одномерного уравнения Шредингера

В последующих соотношениях будем использовать компактную форму записи уравнений (1), (2)

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + g(x)\psi(x) = \varepsilon\psi(x) \quad (3)$$

с граничными условиями $\psi(x_{\min}) = 0$; $\psi(x_{\max}) = 0$. Область изменения аргумента $[x_{\min}; x_{\max}]$ разделим на N отрезков с шагом $h = (x_{\max} - x_{\min})/N$ так, что $x_i = x_{\min} + ih$, $i = 0..N$. Соответственно, в граничных точках $\psi_0 = \psi(x_0) = 0$; $\psi_N = \psi(x_N) = 0$.

Для численного решения будем использовать центральные конечно-разностные аппроксимации второй производной волновой функции, имеющие общий вид

$$\psi''(x_i) = \frac{1}{h^2} \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \psi_{i+k} + O(h^p), \quad (4)$$

где $C_{-p/2}, C_{-p/2+1}, \dots, C_{-1}, C_0, C_1, \dots, C_{p/2-1}, C_{p/2}$ – неопределенные коэффициенты. Вследствие симметрии центральных конечно-разностных выражений справедливы равенства $C_{-p/2} = C_{p/2}, \dots, C_{-1} = C_1$.

Для получения численных значений коэффициентов используем разложение сеточных значений волновой функции, входящих в (4), в ряд Тейлора в форме Лагранжа. Для узлов x_{i+k} , $k = -p/2..p/2$ он имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_{i+k} = \psi(x_i + kh) = \psi_i + kh\psi'_i + \frac{(kh)^2}{2!}\psi''_i + \frac{(kh)^3}{3!}\psi^{(3)}_i + \frac{(kh)^4}{4!}\psi^{(4)}_i + \dots \\ + \frac{(kh)^p}{p!}\psi^{(p)}_i + \frac{(kh)^{p+1}}{p+1!}\psi^{(p+1)}_i + \frac{(kh)^{p+2}}{p+2!}\psi^{(p+2)}(\xi_k); \quad \xi_k \in [x_i; x_{i+k}]. \end{aligned} \quad (5)$$

После суммирования всех уравнений (5), умноженных на коэффициент C_k , получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{h^2} \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \psi_{i+k} = \frac{1}{h^2} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \right) \psi_i + \frac{1}{h} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k \right) \psi'_i + \frac{1}{2!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^2 \right) \psi''_i + \frac{h}{3!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^3 \right) \psi^{(3)}_i + \\ + \frac{h^2}{3!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^4 \right) \psi^{(4)}_i + \dots + \frac{h^{p-2}}{p!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^p \right) \psi^{(p)}_i + \frac{h^{p-1}}{(p+1)!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^{p+1} \right) \psi^{(p+1)}_i + \\ + \frac{h^p}{(p+2)!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^{p+2} \right) \psi^{(p+2)}_i + \frac{h^{p+2}}{(p+4)!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^{p+4} \right) \psi^{(p+4)}(\xi_k). \end{aligned} \quad (6)$$

Обозначив полученные суммы

$$\sigma_s = \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^s, \quad (7)$$

получаем систему $(p+1)$ линейных уравнений для вычисления коэффициентов C_k

$$\sigma_0 = 0; \quad \sigma_1 = 0; \quad \sigma_2 = 2; \quad \sigma_3 = 0; \quad \sigma_4 = 0; \quad \dots \quad \sigma_p = 0. \quad (8)$$

В результате решения системы (8) приходим к явному выражению для конечно-разностной аппроксимации второй производной от волновой функции в i -м узле сетки с точностью $O(h^p)$

$$\left. \frac{d^2 \psi}{dx^2} \right|_i = \frac{1}{h^2} \sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k \psi_{i+k} - \frac{h^p}{(p+2)!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^{p+2} \right) \psi_i^{(p+2)} - \frac{h^{p+2}}{(p+4)!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} C_k k^{p+4} \psi^{(p+4)}(\xi_k) \right). \quad (9)$$

Процедура Нумерова заключается в учете первого слагаемого погрешности путем выражения его через ψ'' на основе исходного уравнения. В данном случае это действие обобщается в виде производной p -го порядка от слагаемых в (3)

$$\psi_i^{(p+2)} = \frac{d^p}{dx^p} \psi_i'' = f(x)_i^{(p)}; \quad f(x) = g(x)\psi(x) - \varepsilon\psi(x). \quad (10)$$

Основная идея выполняемого обобщения заключается в приближенном расчете p -й производной $\left. \frac{d^p f}{dx^p} \right|_i$ с помощью конечно-разностного выражения $\frac{1}{h^p} \sum_{k=-p/2}^{p/2} D_k f_{i+k}$, использующего те же узлы сетки, что и (4). Для неопределенных коэффициентов D_k аналогичным образом получаем систему линейных уравнений

$$\tilde{\sigma}_0 = 0; \quad \tilde{\sigma}_1 = 0; \quad \tilde{\sigma}_2 = 0; \quad \tilde{\sigma}_3 = 0; \quad \dots \quad \tilde{\sigma}_p = p!, \quad (11)$$

где $\tilde{\sigma}_k$ обозначены такие же суммы, что и в (6), но для коэффициентов D_k .

Таким образом, для p -й производной в правой части (10) получаем

$$\left. \frac{d^p f}{dx^p} \right|_i = \frac{1}{h^p} \sum_{k=-p/2}^{p/2} D_k f_{i+k} - \frac{h^2}{(p+2)!} \left(\sum_{k=-p/2}^{p/2} D_k k^{p+2} \right) f_i^{(p+2)}(\xi). \quad (12)$$

Выражая $\psi_i^{(p+2)}$ с помощью (10), (12) и подставляя в (9), получаем явный вид системы соотношений, выражающих аппроксимацию уравнения Шредингера по обобщенному методу Нумерова с порядком точности $p+2$

$$\sum_{k=-p/2}^{p/2} \left\{ -\frac{C_k}{h^2} + \frac{\sigma_{p+2}}{(p+2)!} D_k g_{i+k} + \delta_{k,0} g_i \right\} \psi_{i+k} = \varepsilon \sum_{k=-p/2}^{p/2} \left\{ \frac{\sigma_{p+2}}{(p+2)!} D_k + \delta_{k,0} \right\} \psi_{i+k} + O(h^{p+2}), \quad i=1..N-1. \quad (13)$$

Записав систему уравнений (13) в матричной форме, получаем обобщенную матричную задачу на собственные значения

$$A\psi = \varepsilon B\psi. \quad (14)$$

Для случая $p=2$ (стандартный метод Нумерова) значения коэффициентов $C_{-1}=1$, $C_0=-2$, $C_1=1$, $D_{-1}=1$, $D_0=-2$, $D_1=1$, и система (13) принимает вид, совпадающий с известным [2], [3]

$$\left(-\frac{1}{h^2} + \frac{g_{i-1}}{12} \right) \psi_{i-1} + \left(\frac{2}{h^2} + \frac{10}{12} g_i \right) \psi_i + \left(-\frac{1}{h^2} + \frac{g_{i+1}}{12} \right) \psi_{i+1} = \varepsilon \left(\frac{1}{12} \psi_{i-1} + \frac{10}{12} \psi_i + \frac{1}{12} \psi_{i+1} \right). \quad (15)$$

Погрешность аппроксимации в данном случае имеет порядок $O(h^4)$.

Рассмотрим далее случай $p=4$. При этом на основании (8) и (11) получаем значения коэффициентов

$$D_{-2}=1, \quad D_{-1}=-4, \quad D_0=6, \quad D_1=-4, \quad D_2=1, \\ C_{-2}=-1/12, \quad C_{-1}=16/12, \quad C_0=-30/12, \quad C_1=16/12, \quad C_2=-1/12,$$

и система сеточных уравнений (13) имеет вид

$$\left(\frac{1}{12h^2} - \frac{g_{i-2}}{90} \right) \psi_{i-2} + \left(-\frac{16}{12h^2} + \frac{4g_{i-1}}{90} \right) \psi_{i-1} + \left(\frac{30}{12h^2} + \frac{84}{90} g_i \right) \psi_i + \left(-\frac{16}{12h^2} + \frac{4g_{i+1}}{90} \right) \psi_{i+1} + \\ + \left(\frac{1}{12h^2} - \frac{g_{i+2}}{90} \right) \psi_{i+2} = \varepsilon \left(-\frac{1}{90} \psi_{i-2} + \frac{4}{90} \psi_{i-1} + \frac{84}{90} \psi_i + \frac{4}{90} \psi_{i+1} - \frac{1}{90} \psi_{i+2} \right), \quad i=1..N-1. \quad (16)$$

Погрешность аппроксимации в этом случае имеет порядок $O(h^6)$.

Решая систему уравнений (8) с учетом (7), получаем значения коэффициентов для центральных конечно-разностных аппроксимаций второй производной (таблица 1).

Таблица 1 – Коэффициенты центральных конечно-разностных вторых производных

P	C_0	$C_{-1} = C_1$	$C_{-2} = C_2$	$C_{-3} = C_3$	$C_{-4} = C_4$	$C_{-5} = C_5$	$C_{-6} = C_6$
2	-2	1					
4	-5/2	4/3	-1/12				
6	-49/18	3/2	-3/20	1/90			
8	-205/72	8/5	-1/5	8/315	-1/560		
10	-5269/1800	5/3	-5/21	5/126	-5/1008	1/3150	
12	-5369/1800	12/7	-15/56	10/189	-1/112	2/1925	-1/16632

В результате решения системы уравнений (11) получаем значения коэффициентов для центральных конечно-разностных аппроксимаций P-й производной (таблица 2).

Таблица 2 – Коэффициенты центральных конечно-разностных производных порядка P

P	D_0	$D_{-1} = D_1$	$D_{-2} = D_2$	$D_{-3} = D_3$	$D_{-4} = D_4$	$D_{-5} = D_5$	$D_{-6} = D_6$
2	-2	1					
4	6	-4	1				
6	-20	15	-6	1			
8	70	-56	28	-8	1		
10	-252	210	-120	45	-10	1	
12	924	-792	495	-220	66	-12	1

Исследование практического порядка сходимости обобщенного метода Нумерова

Программная реализация обобщенного метода Нумерова для $P = 2..12$ выполнена в системе Matlab. В качестве первой тестовой задачи рассмотрено численное решение одномерного уравнения Шредингера с потенциалом гармонического осциллятора. В системе единиц $\hbar = 1$, $m = 0.5$ потенциал имеет вид $V(x, y) = x^2 / 2$, а точные собственные значения энергии $\varepsilon_k = k + 1/2$, $k = 0, 1, \dots$. Значения погрешности численного решения для первых 50 уровней приведены в таблице 3 для классического метода Нумерова ($P = 2$) и обобщенного метода с порядком $P = 4..12$ ($x_{\min} = -20$, $x_{\max} = 20$, $h = 0.05$).

Таблица 3 – Погрешность расчета уровней энергии одномерного гармонического осциллятора для классического метода Нумерова ($P = 2$) и обобщенного метода с порядком $P = 4..12$

k	P = 2	P = 4	P = 6	P = 8	P = 10	P = 12
0	-7.8e-005	-6.5e-008	-9.1e-011	4.7e-013	-7.7e-012	1.7e-010
5	-4.8e-003	-1.5e-005	-6.2e-008	-3.1e-010	-9.5e-012	1.7e-010
10	-1.7e-002	-1.0e-004	-7.6e-007	-6.6e-009	-7.1e-011	1.7e-010
15	-3.8e-002	-3.2e-004	-3.5e-006	-4.4e-008	-6.2e-010	1.7e-010
20	-6.6e-002	-7.4e-004	-1.1e-005	-1.8e-007	-3.2e-009	1.2e-010
25	-1.0e-001	-1.4e-003	-2.5e-005	-5.2e-007	-1.1e-008	-9.3e-011
30	-1.5e-001	-2.4e-003	-5.2e-005	-1.3e-006	-3.3e-008	-7.5e-010
35	-2.0e-001	-3.8e-003	-9.5e-005	-2.7e-006	-8.2e-008	-2.5e-009
40	-2.6e-001	-5.7e-003	-1.6e-004	-5.1e-006	-1.8e-007	-6.4e-009
45	-3.3e-001	-8.0e-003	-2.5e-004	-9.1e-006	-3.6e-007	-1.4e-008
50	-4.0e-001	-1.1e-002	-3.8e-004	-1.5e-005	-6.6e-007	-3.0e-008

По результатам трех последовательных расчетов для величины шага h , $h/2$, $h/4$ можно определить практический порядок сходимости численного метода \tilde{P}

$$\tilde{P} = \log_2 \left(\frac{\varepsilon^{(h)} - \varepsilon^{(h/2)}}{\varepsilon^{(h/2)} - \varepsilon^{(h/4)}} \right). \quad (20)$$

Применяя эту формулу для оценки энергетических уровней гармонического осциллятора, получаем значения практического порядка сходимости \tilde{P} для различных значений порядка аппроксимации P второй производной в уравнении Шредингера (таблица 4).

Таблица 4 – Практический порядок сходимости обобщенного метода Нумерова при численном решении одномерного уравнения Шредингера с потенциалом гармонического осциллятора

K	P = 2	P = 4	P = 6	P = 8	P = 10	P = 12
0	2.01	3.95	5.88	7.79	9.67	11.53
5	2.03	3.94	5.86	7.75	9.62	11.46
10	2.04	3.93	5.83	7.71	9.56	11.39
15	2.05	3.91	5.79	7.66	9.50	11.31
20	2.07	3.90	5.76	7.60	9.43	11.23
25	2.09	3.89	5.72	7.55	9.35	11.14
30	2.11	3.88	5.69	7.49	9.28	11.04
35	2.13	3.88	5.66	7.44	9.20	10.94
40	2.15	3.87	5.63	7.38	9.12	10.84
45	2.18	3.87	5.60	7.33	9.04	10.74
50	2.20	3.88	5.58	7.28	8.97	10.64

Таким образом, практический порядок сходимости различных вариантов обобщенного метода Нумерова соответствует теоретическому значению.

Обобщенный метод Нумерова использован также для численного решения радиального уравнения Шредингера (2) с потенциалом Вудса-Саксона при $l = 0$

$$V(r) = \frac{a}{1+D} - \frac{acD}{(1+D)^2}; \quad D = e^{c(r-b)}; \quad a = -50, \quad b = 7, \quad c = 5/3. \quad (21)$$

При решении радиального уравнения в точке $r = 0$ учитывалось граничное условие точки симметрии $dR/dr = 0$. В таблице 5 приведены значения уровней энергии, вычисленные при $h = 0.02$, $r_{\min} = 0$, $r_{\max} = 16$, а также результаты работы [7], полученные с точностью 10^{-14} .

Таблица 5 – Результаты численного решения радиального уравнения Шредингера с потенциалом Вудса-Саксона обобщенным методом Нумерова

k	E_k [7]	P = 4	P = 8	P = 12
0	-49.457788728083	-49.457788728498	-49.457788728080	-49.457788728089
1	-48.148430420006	-48.148430429375	-48.148430420003	-48.148430420012
2	-46.290753954466	-46.290754022469	-46.290753954461	-46.290753954471
3	-43.968318431814	-43.968318715399	-43.968318431808	-43.968318431818
4	-41.232607772180	-41.232608632046	-41.232607772172	-41.232607772183
5	-38.122785096728	-38.122787218323	-38.122785096719	-38.122785096730
6	-34.672313205700	-34.672317735643	-34.672313205691	-34.672313205700
7	-30.912247487909	-30.912256172372	-30.912247487908	-30.912247487909
8	-26.873448916060	-26.873464221039	-26.873448916078	-26.873448916058
9	-22.588602257693	-22.588627440000	-22.588602257756	-22.588602257691
10	-18.094688282124	-18.094727358668	-18.094688282276	-18.094688282121
11	-13.436869040250	-13.436926555547	-13.436869040560	-13.436869040246
12	-8.676081670737	-8.676162029944	-8.676081671305	-8.676081670731
13	-3.908232481206	-3.908338092841	-3.908232482150	-3.908232481201

Изменение десятичного логарифма погрешности (по сравнению с результатами [7]) для указанных в таблицах уровней $k = 0..13$ отражено на рисунке 1.

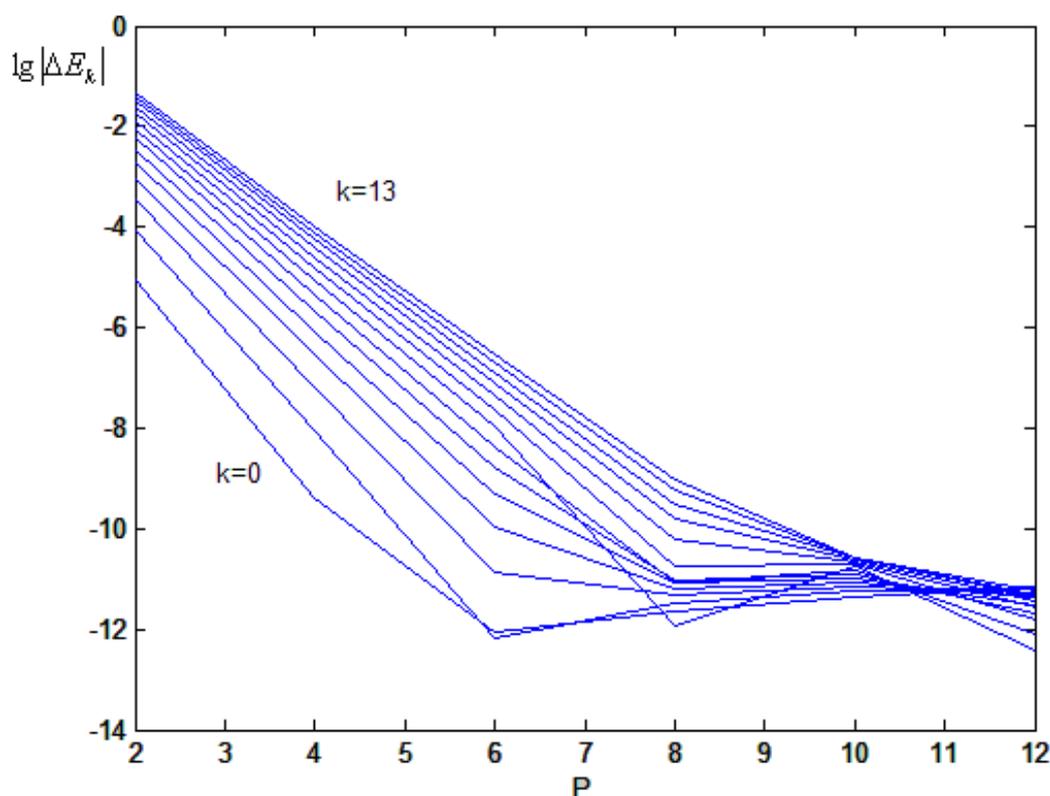


Рисунок 1 – График десятичного логарифма погрешности для энергетических уровней потенциала Вудса-Саксона при различных значениях порядка обобщенного метода Нумерова

Анализ графиков погрешности показывает, что при достижении определенного значения P реализуется точность результатов, сопоставимая с точностью компьютерного представления данных, так что дальнейшего улучшения результатов при увеличении P в обычной практике расчетов не происходит. Это отражает существенное повышение точности результатов, достигаемое при использовании обобщенного метода Нумерова.

Заключение

В работе предложен новый эффективный метод численного решения уравнения Шредингера для связанных состояний, основанный на обобщении метода Нумерова с использованием конечно-разностных производных высших порядков точности. Получены расчетные формулы для произвольного четного порядка P , вычислены коэффициенты для $P = 2..12$. Выполнено практическое исследование вычислительной эффективности метода на примере одномерного гармонического осциллятора и потенциала Вудса-Саксона.

Приведенные результаты подтверждают существенное уменьшение погрешности численного решения стационарного уравнения Шредингера при использовании обобщенного метода Нумерова.

Литература

1. Давыдов, А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. – 2-е изд. – М. : Наука, 1973. – 704 с.
2. González, J.L.M. Getting started with Numerov's method / J.L.M. González, D. Thompson // Computers in Physics. – 1997. – Vol. 11. – P. 514–515.

3. Vigo-Aguiar, J. A variable-step Numerov method for numerical solution of the Schrödinger equation / J. Vigo-Aguiar, H.A. Ramos // J. Math. Chem. – 2005. – Vol. 37. – P. 255–262.
4. Bougouffa, S. The study of atomic transitions by use of Numerov technique in schematic model / S. Bougouffa // Fizika A. – 2006. – Vol. 15. – P. 193–208.
5. Турчак, Л.И. Основы численных методов / Л.И. Турчак, П.В. Плотников. – 2-е изд. – М. : Физматлит, 2003. – 304 с.
6. Парлетт, Б. Симметричная проблема собственных значений. Численные методы / Б. Парлетт – М.: Мир, 1983. – 384 с.
7. Ledoux, V. Solution of the Schrödinger equation by a high order perturbation method based on a linear reference potential / V. Ledoux, M. Rizea, L. Ixaru, G. Vanden Berghe, M. Van Daele // Comput. Phys. Commun. – 2006. – Vol. 175. – P. 424–439.

Гомельский государственный
университет им. Ф. Скорины

Поступило 15.10.12

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. СКОРИНЫ