

### Пример: уравнение Шредингера – 1, бесконечно глубокая потенциальная яма

Приведем еще одну яркую иллюстрацию применения метода пристрелки для нахождения собственных значений ОДУ. Учитывая, что принцип решения остается тем же, ограничимся на этот раз минимальными комментариями.

Рассмотрим стационарное уравнение Шредингера, описывающее поведение частицы с массой  $m$  в потенциале  $U(x)$  (его характерная форма показана на

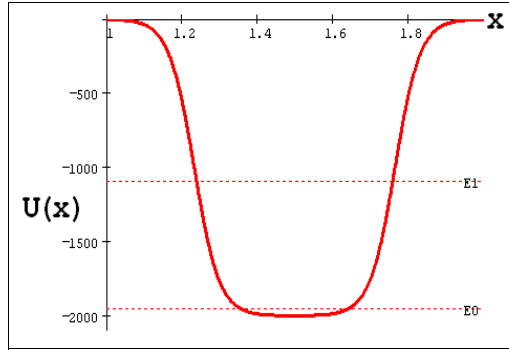


Рис. 14. Потенциал  $U(x)$

рис. 14, а конкретную математическую формулу Вы отыщите в соответствующем файле на компакт-диске):

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U(x)) \cdot \psi(x) = 0 \quad (20)$$

Требуется отыскать собственные значения  $E$ , которые имеют смысл энергии частицы и соответствующие им собственные функции  $\psi(x)$ , называемые в квантовой теории *волновыми функциями*. Смысл волновой функции состоит в том, что она (а точнее, ее вторая степень) определяет вероятность нахождения частицы в положении  $x$ .

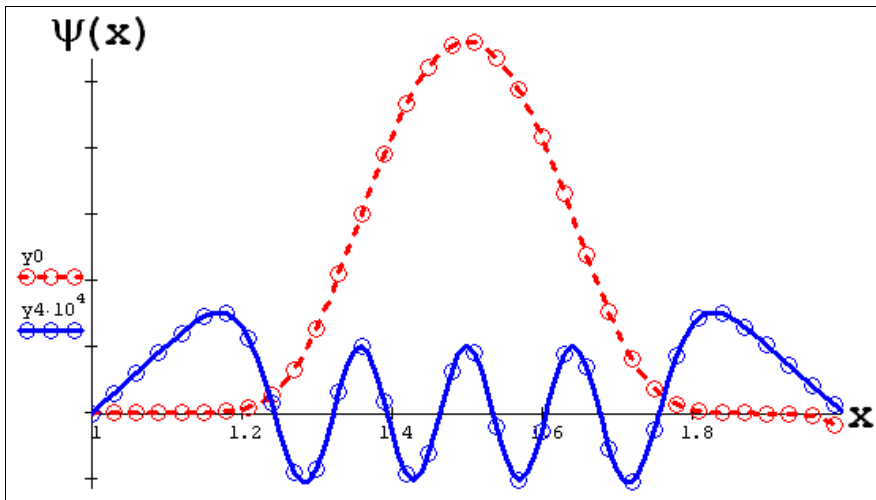
Если считать, что частица находится в потенциальной яме, и для значений  $x$  за пределами интервала  $[1, 2]$ , показанного на рис. 15, потенциал равен бесконечности, то там решением уравнения (20) будет функция  $\psi(x) = 0$ . Соответственно, можно считать, что краевые условия на границах интервала:  $\psi(0) = \psi(1) = 0$ .

$$(21)$$

2 Пример: уравнение Шредингера – 1, бесконечно глубокая потенциальная яма

Разумеется, задача (20-21) имеет тот же вид, что и формула (9), т.е.  $\psi''(x) = -k^2 \cdot \psi(x)$ . Несущественным отличием является зависимость  $k$  от  $x$  из-за входящего в него  $U(x)$ . Примечательно, однако, что, в отличие от предыдущих примеров, сформулированную задачу можно решить только численно, если, конечно, не выбирать слишком простых частных случаев потенциала  $U(x)$ . Будем далее считать, что  $2m/\hbar^2 = 1$ , чего легко добиться заменой переменной  $x \leftarrow x \cdot \sqrt{2m/\hbar^2}$ .

Вычисленные собственные функции для 0-го и 4-го собственного значения  $E_0$  и  $E_4$  показаны на рис. 15, а для  $E_1$  и  $E_4$  – на рис. 16. Сами собственные значения, определенные пристрелкой, отмечены пунктиром, наряду с потенциалом  $U(x)$ , на рис. 14 и во врезке рис. 16.



*Рис. 15. 0-я и 4-я собственные функции уравнения Шредингера (20)*

Следует отметить тот факт, что для каждого из собственных значений энергии, например  $E_1$ , соответствующая волновая функция осциллирует в средней области, там, где  $U(x) < E_1$  и экспоненциально затухает к краям ямы при  $U(x) > E_1$  (рис. 16).

Еще один важный, с вычислительной точки зрения, факт связан с поведением вычисленной собственной функции вблизи правой

границы интервала. Как видно из рис. 16, погрешность численного метода в этой области увеличивается.

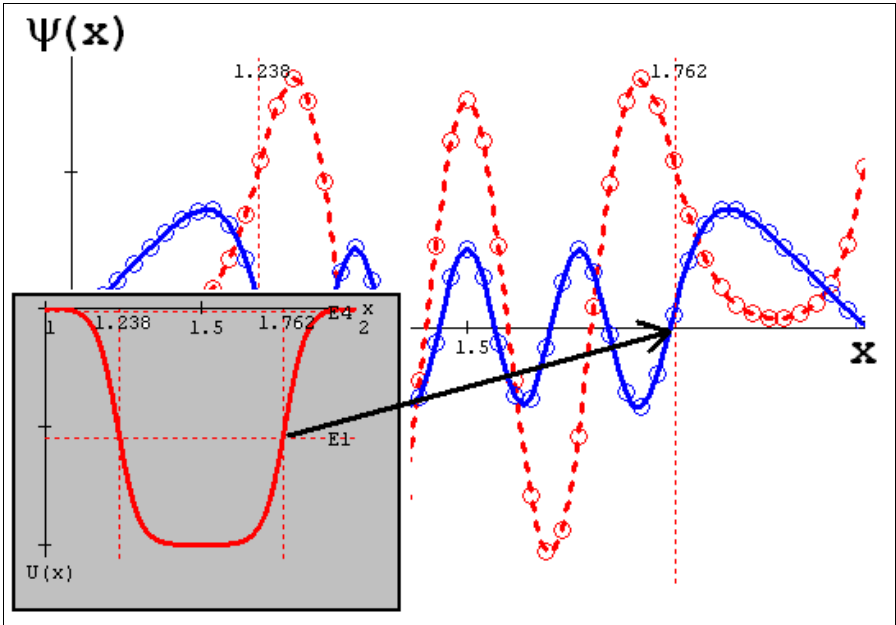
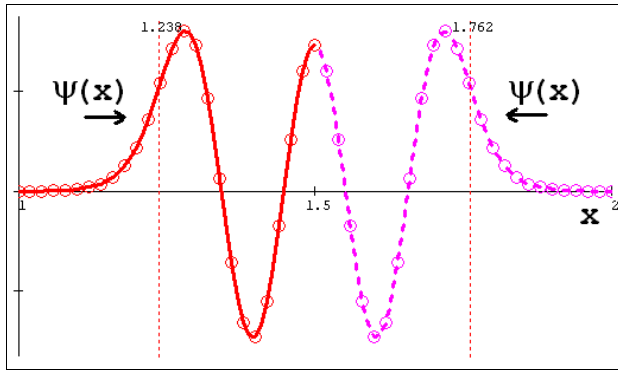


Рис. 16. 1-я и 4-я собственные функции уравнения Шредингера (20)

Так происходит из-за нарастания погрешностей округления, которые, при движении в сторону экспоненциального затухания, приводят к неустойчивости алгоритма. Если, после завершения пристрелки и нахождения собственного значения энергии проинтегрировать уравнение во встречных направлениях – не только от 1 к 2, но и от 2 к 1, то это решит проблему (рис. 17).

4 Пример: уравнение Шредингера – 1, бесконечно глубокая потенциальная яма



Пример:  
уравнение

Рис. 17. Сшивка собственной функции (20)

**Шредингера – 2,  
потенциальная яма конечной глубины**

Приведем решение еще одной задачи для уравнения Шредингера (20) для несколько другой потенциальной ямы, имеющей ту же самую форму, что и на рис. 15, но другую за пределами рассматриваемого интервала, в качестве которого выберем не интервал [1,2], а [-a,a]. А именно, будем использовать не  $U(x)=\infty$ , а  $U(x)=\text{const}=0$ , что приведет к ненулевому решению  $\psi(x)\neq 0$  за пределами потенциальной ямы. Для данного случая следует выписать другие граничные условия.

Уравнение Шредингера (20) за пределами интервала [-a,a] примет вид:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E \cdot \psi(x) = 0 \quad (22)$$

Предположим сначала, что  $E < 0$ , как получалось в предыдущем примере. Тогда решением, в чем нетрудно убедиться аналитически, будут экспоненциально-убывающие (при  $x \rightarrow \pm\infty$ ) функции:

$$\psi(x) = C_1 \cdot \exp(\sqrt{-E} \cdot x) \quad , \quad \text{при } x < -a; \quad (23)$$

$$\psi(x) = C_2 \cdot \exp(-\sqrt{-E} \cdot x) \quad , \quad \text{при } x > a. \quad (24)$$

Т.к. волновая функция должна быть непрерывной при  $x=\pm a$ , то подстановка в (23–24)  $x=\pm a$  даст нам сразу краевые условия на границах интервала. Однако, следует помнить, что  $E$  – это пристрелочный параметр, т.е. собственное значение задачи (20), подлежащее определению. Вспоминая эффект появления большой погрешности при определении решения задачи Коши в районе правой границы интервала (см. рис. 16), следует констатировать, что условие (24) при  $x=a$  оказывается бесполезным. Поэтому, с вычислительной точки зрения, выгоднее использовать в краевых условиях не условия (23–24), а следующие из них комбинации  $\psi$  и  $\psi'$ , расчет которых будет более устойчивым:

$$\psi'(-a) = \sqrt{-E} \cdot \psi(-a) \quad , \quad (25)$$

$$\psi'(a) = -\sqrt{-E} \cdot \psi(a) \quad . \quad (26)$$

Что из себя представляют краевые условия (25–26)? Они связывают между собой (неизвестные) значения  $\psi$  и  $\psi'$  на границах ямы и (неизвестное же) собственное значение  $E$ . Поэтому, на первый взгляд, кажется, что пристрелку придется проводить не по одному, как раньше, а по трем параметрам. Однако, следует снова вспомнить, что уравнение Шредингера (20) – однородное, поэтому одно из краевых условий можно задать произвольным образом, например:

$$\psi'(-a) = 1. \quad (27)$$

Тогда подстановка (27) в (25) даст:

$$\psi(-a) = 1 / \sqrt{-E} \quad (28)$$

т.е. зависимость левого краевого условия для  $\psi$  от собственного значения  $E$ . Поэтому организация алгоритма решения задачи (20) с крайними условиями (26-28) снова, к счастью, сведется к пристрелке по одному параметру  $E$ .

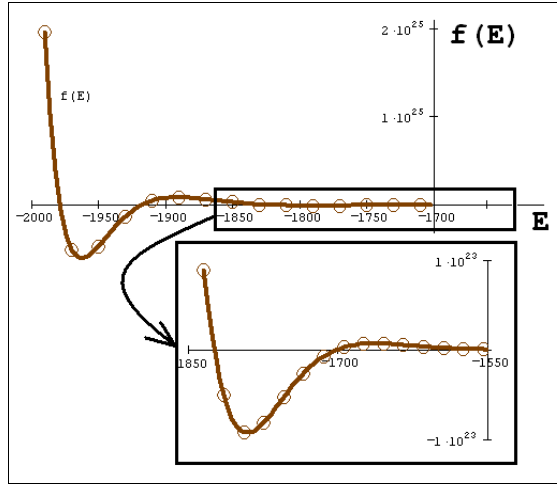


Рис. 18. Функция невязки  $f(E)$  для правого граничного условия (26)

Действительно, если выбрать в качестве начального приближения некоторое  $E = E_0 < 0$  (произвольным образом, близко к «дну» ямы), то оба левых условия пробной задачи Коши, согласно (28) и (27), будут определены, и алгоритм пристрелки по параметру  $E$  сведется к решению серии пробных задач Коши, обеспечивающих выполнение в результате правого граничного условия (26). На рис. 18 показан соответствующий график невязки правого условия в зависимости от пробных собственных значений задачи.

Результаты расчетов по описанным формулам показаны на рис. 19. Следует подчеркнуть, что они получены, подобно рис. 17, путем встречного интегрирования задач Коши (после того, как собственные значения  $E$  были определены с помощью пристрелки).

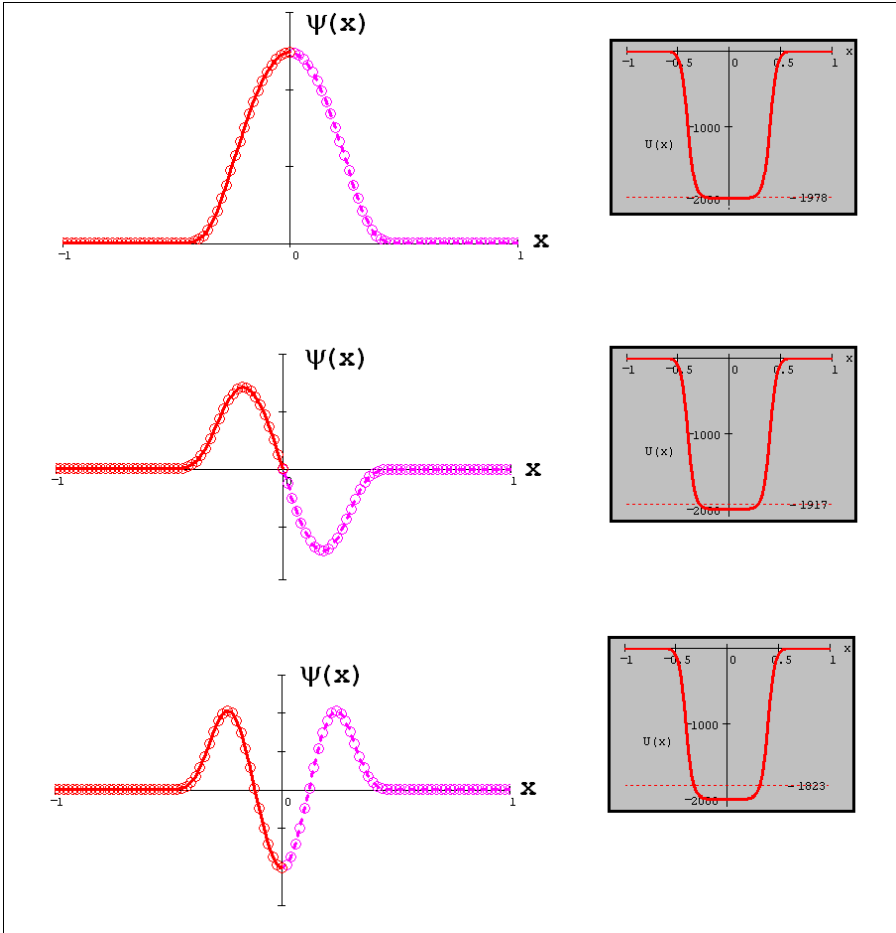
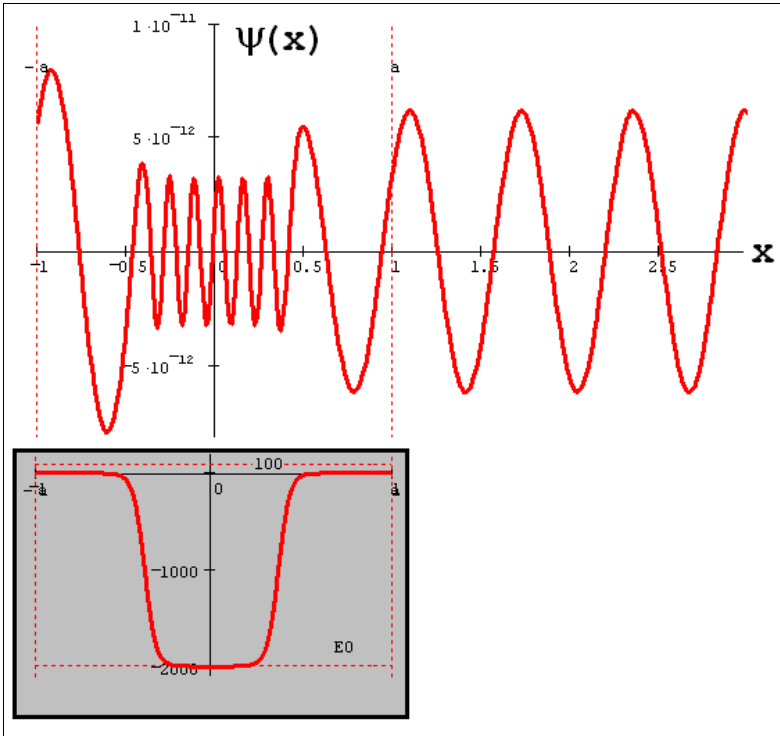


Рис. 19. Три первых собственных функции уравнения Шредингера

Завершим разговор об уравнении Шредингера его решением для  $E > 0$ . В этом случае, как известно, за пределами ямы волновая функция имеет форму колебаний, а спектр получается непрерывным (любое положительное число является собственным значением задачи). Вариант расчетов для произвольного значения  $E=100$  показан на рис. 20. Как и предсказывается квантовой механикой, соответствующее движение частицы носит инфинитный характер, представляя собой

8 Пример: уравнение Шредингера – 1, бесконечно глубокая потенциальная яма

колебания (разной амплитуды) как внутри, так и снаружи потенциальной ямы.



**Рис. 20.** Волновая функция при  $E > 0$  (непрерывный спектр)

Для того, чтобы соблюсти непрерывность волновой функции и ее производной, необходимо, вместо начального условия (27), организовать пристрелку по  $\psi'(-a)$ . Т.е. для расчета  $\psi(x)$  в области непрерывного спектра также приходится решать краевую задачу. Отметим, что часть волновой функции вне ямы (правая половина графика на рис. 20) получена путем численного решения задачи Коши, начиная от точки  $x = -a$ .

Приведенная организация алгоритма пристрелки является типовой и годится для численного решения одномерного стационарного уравнения Шредингера с другими потенциалами  $U(x)$ .



**Пример: уравнение Шредингера – 3,  
сферически-симметричный потенциал**

Рассмотренные выше примеры применения уравнения Шредингера (20) носили иллюстративный характер, поскольку относились к одномерному движению частиц, в то время, как ясно, что на самом деле движение происходит в трехмерном пространстве. Уравнение Шредингера при этих предположениях приобретает форму уравнения в частных производных:

$$\Delta \psi(\vec{r}) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U(\vec{r})) \cdot \psi(\vec{r}) = 0 \quad (29)$$

Зависимость от радиус-вектора эквивалентна зависимости от трех координат x, y, z. Если же предположить, что потенциал U(r) является сферически-симметричным (рис. 21), т.е. зависит только от расстояния до начала координат, то (29) вновь приобретает

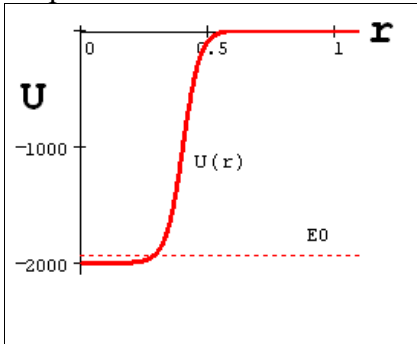


Рис. 21. Потенциал U(r)

форму ОДУ, которое, к тому же, простой заменой  $\psi(r) = \chi(r)/r$  приводится к виду (20):

$$\frac{d^2 \chi(r)}{dr^2} + (E - U(r)) \cdot \chi(r) = 0. \quad (30)$$

Единственным отличием от рассмотренных нами случаев будут иные граничные условия:

$$\chi(0) = 0, \quad \chi(a) = \exp(-a \cdot \sqrt{-E})/a \quad (31)$$

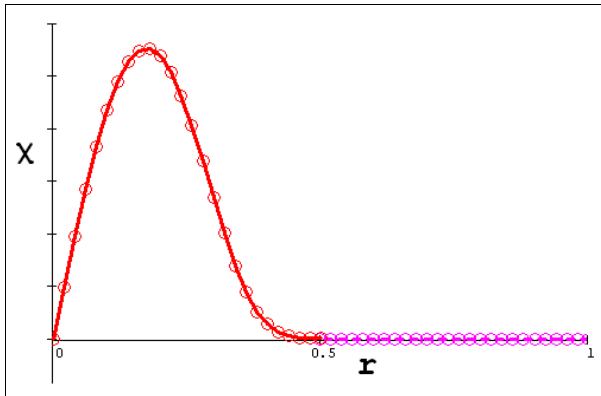


Рис. 22. Функция  $\chi = \psi/r$  (для  $E_0$ )

Как уже обсуждалось, вместо правого условия (31) лучше использовать соответствующее соотношение между  $\chi$  и  $\chi'$ . Тогда результат применения пристрелки для определения нулевого собственного значения (наинизшего уровня энергии) будет таким, как показано на рис. 22 (для функции  $\chi$ ) и 23 (для  $\psi = \chi \cdot r$ ). Обратите внимание на дефект расчета у правой границы на рис. 23, появляющийся по той же причине, которая обсуждалась при анализе рис. 16. Отсутствие такого дефекта на рис. 22 связано с тем, что он получен путем встречного интегрирования уравнения Шредингера (из точки  $r=0$  до середины интервала, а потом от  $r=1$  также до середины).

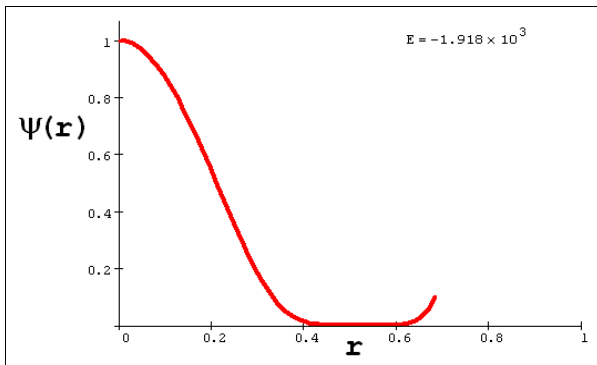


Рис. 23. Волновая функция  $\psi(r)$  (для  $E_0$ )

