Az 1-dimenziós Schrödinger-egyenlet numerikus megoldása

Bartha Ferenc*
Szegedi Tudományegyetem, Elméleti Fizikai Tanszék
készültség: April 24, 2003
(http://www.jate.u-szeged.hu/~barthaf/oktatas.htm)

1. MEGJEGYZÉSEK A MEGOLDÁSHOZ

Az óravázlatban a közönséges differenciálegyenletek kapcsán tárgyaltuk a probléma minkét vonatkozását. A Numerov-módszerrel oldjuk meg a peremérték-problémát és shooting-módszerrel keressük a

$$\begin{aligned} H\varphi_\mu(x) &= E_\mu \varphi_\mu(x) \ , \ \ \mu = 0, 1, 2, ..., NodesMax \\ \text{peremfeltétel} \ &: \ \ \varphi_\mu(x = \pm 1) = 0 \end{aligned}$$

sajátértékeket és sajátfüggvényeket.

A "legegyszerűbb" eset, ha a $V(x) \equiv 0$, ekkor az analitikus megoldást is ismerjük (∼részecske dobozban). A másik bemutatott megoldás az intervallumon harmónikus potenciált vizsgál.

A meghatározott stacionárius állapotokból felépítjük a

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=0}^{NodesMax} \varphi_\mu(x) e^{-iE_\mu t}$$

hullámfüggvényt. Ez "egzakt" megoldása az időfüggő Schrödinger-egyenletnek, ami egy parabolikus parciális differenciálegyenlet. Az óravázlatban a Crank-Nicholson-sémát kidolgoztuk erre az IVP feladatra. Most a kezdeti feltétel legyen

$$\psi(x, t = 0) = \Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{NodesMax} \varphi_\mu(x)$$

így a programunk által számolt evolúciót össze tudjuk hasonlítani az "egzakt" $\Psi(x,t)$-vel. A beprogramozott eljárás a **CN-**formulát használja:

$$-a\psi_{j+1}^{n+1} + (1 + 2a + b_j)\,\psi_j^{n+1} - a\psi_{j-1}^{n+1} = a\psi_{j+1}^n + (1 - 2a - b_j)\,\psi_j^n + a\psi_{j-1}^n \ ; \quad a = \frac{i\delta t}{2\,(\delta x)^2} \ ; \ b_j = \frac{i\delta t}{2} V(x_j)$$

vagy mátrix alakban

$$\mathbf{A} \cdot \psi^{n+1} = \mathbf{d} \qquad \text{ahol} \qquad \mathbf{d}_j = a\psi_{j+1}^n + (1 - 2a - b_j)\,\psi_j^n + a\psi_{j-1}^n$$

és $\mathbf{A}$ tridiagonális mátrix:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ AL_2 & AD_2 & AU_2 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & AL_3 & AD_3 & AU_3 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \ddots & \ddots & \ddots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \ddots & \ddots & \ddots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & AL_{N-1} & AD_{N-1} & AU_{N-1} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \left\{ \begin{array}{l} AL_j = AU_j = -a \\ AD_j = 1 + 2a + b_j \end{array} \ \ j = 2, ..., N-1 \right\}$$

*Electronic address: `barthaf@physx.u-szeged.hu`