

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ М.В.ЛОМОНОСОВА

Численное решение стационарного уравнения Шредингера для двумерного несимметричного потенциала

Выполнил:
Студент 208 группы
Рябченко Д.В.

Постановка задачи

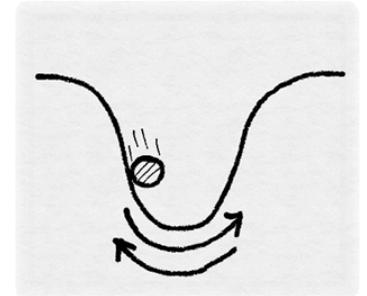
Общий вид уравнения Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = \hat{H} \Psi$$



Стационарное уравнение Шредингера:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}) \right) \psi = E\psi$$



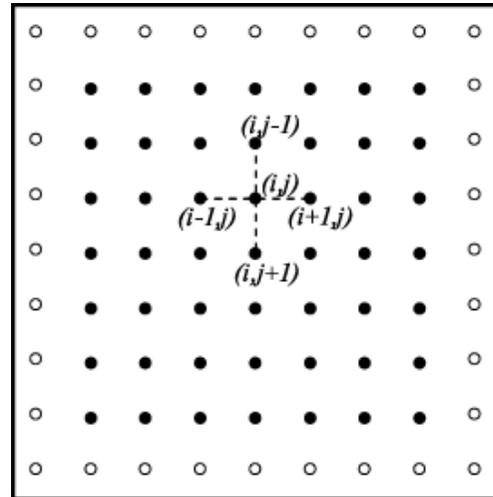
Численные методы

‘Рабочая’ форма уравнения Шредингера:

$$-\left(\Psi'_{i-1}{}^j + \Psi'_{i+1}{}^j + \Psi'_{i-1}{}^{j-1} + \Psi'_{i+1}{}^{j+1}\right) + \Psi'_{i-1}{}^j (U'(x, y) + 4) = E' \Psi'_{i-1}{}^j$$

Граничные условия:

$$\Psi'_{i-1}{}^j = 0$$

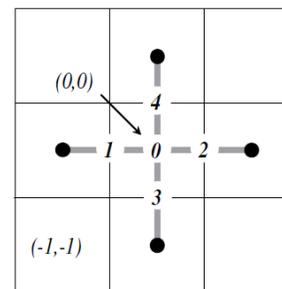
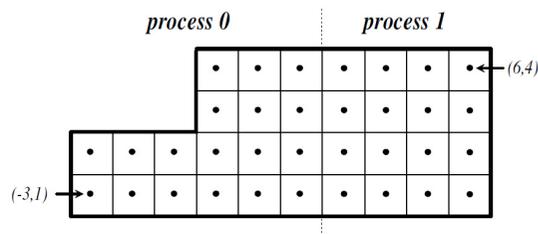


Численные методы



Structured-Grid System Interface

- 1) задание сетки
- 2) задание шаблона
- 3) создание матрицы системы
- 4) Создание столбца b



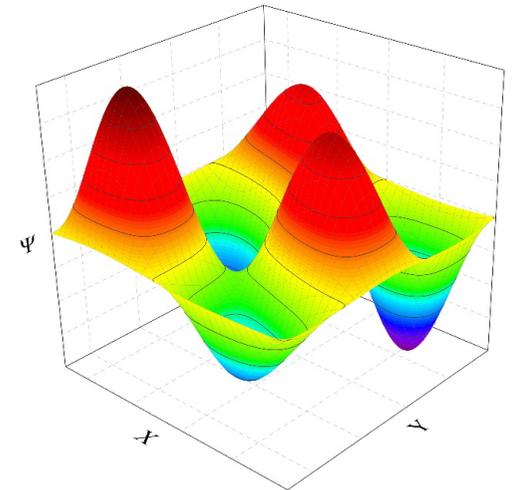
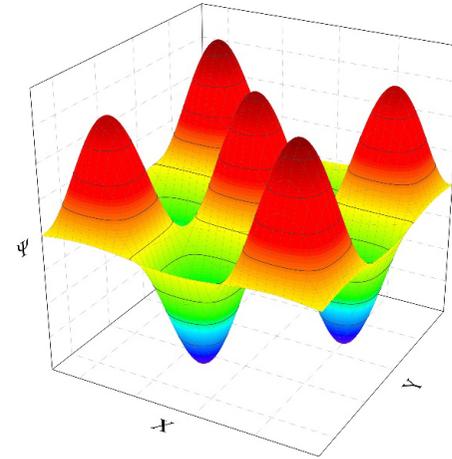
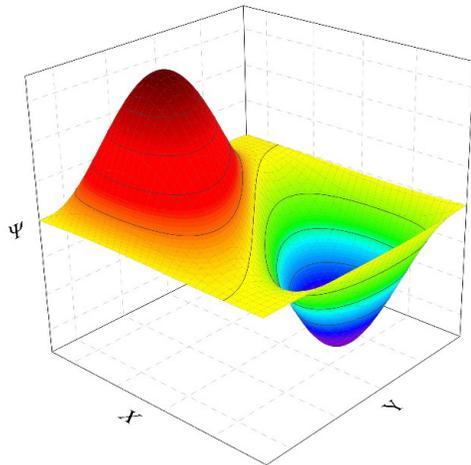
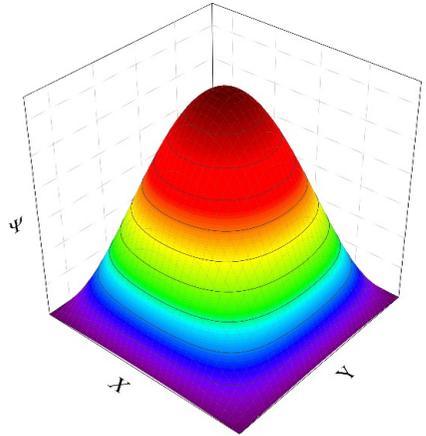
LOBPCG solver:

- 1) инициализация “решателя” через функцию Create()
- 2) Выбор параметров решения
- 4) Подготовка библиотечных типов данных для хранения решения
- 5) решение задачи
- 6) сохранение решения

Locally Optimal Block
Preconditioned Conjugate Gradient

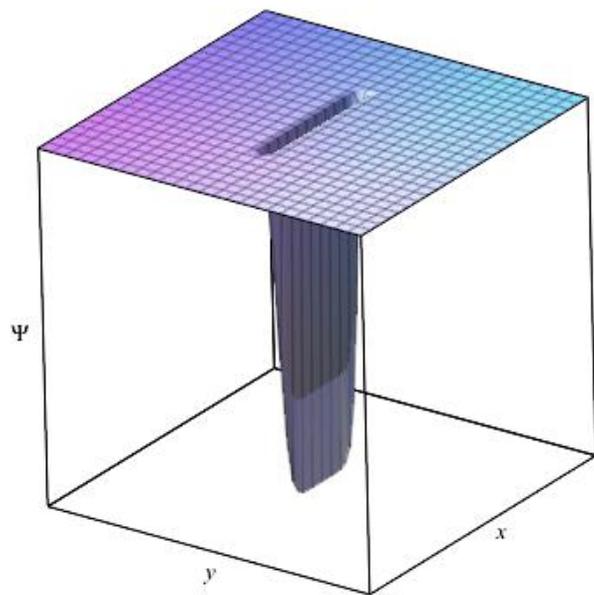
$$T(A - \text{ant} B)x = 0$$

Результаты



Потенциальная яма с бесконечными стенками

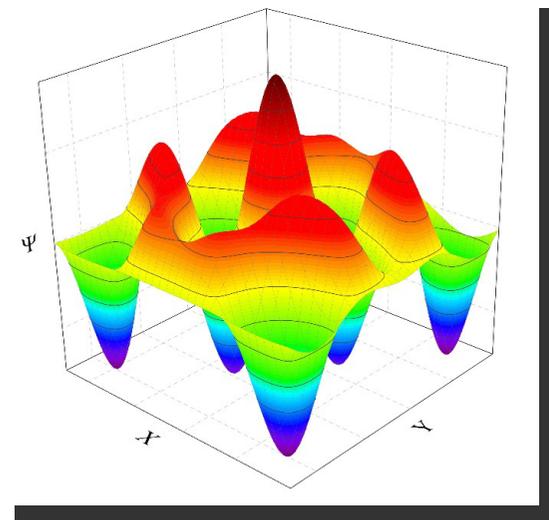
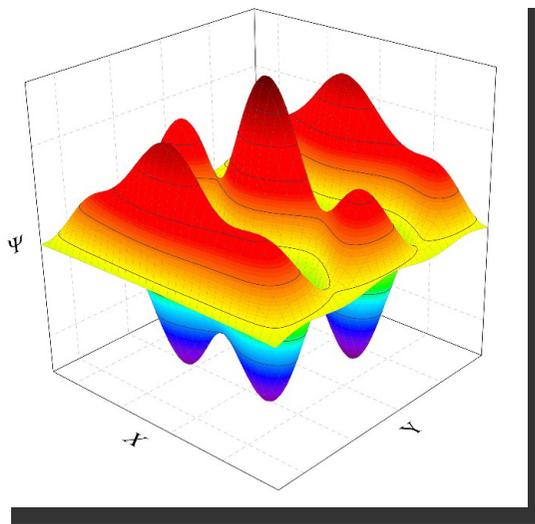
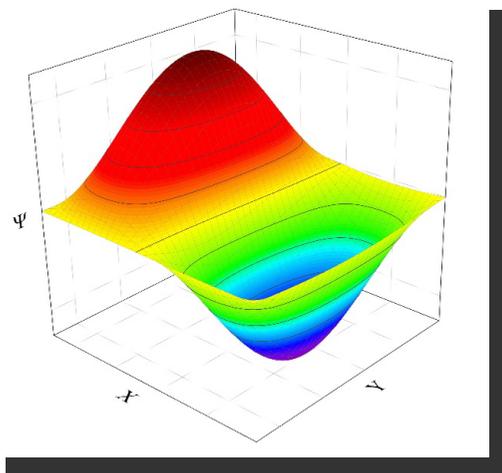
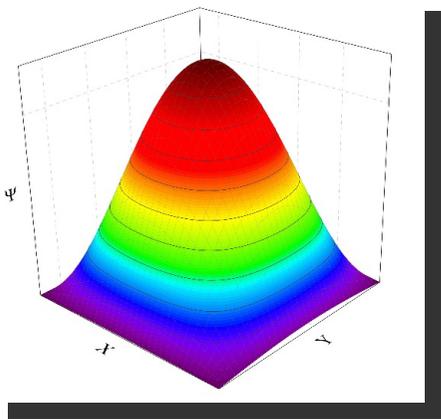
Результаты



$$U(x, y) = 1 - \exp\left(-\left(\frac{\cosh(x-0.5)^3 - 1 + \text{abs}(y-0.5)}{0.05}\right)^4\right)$$

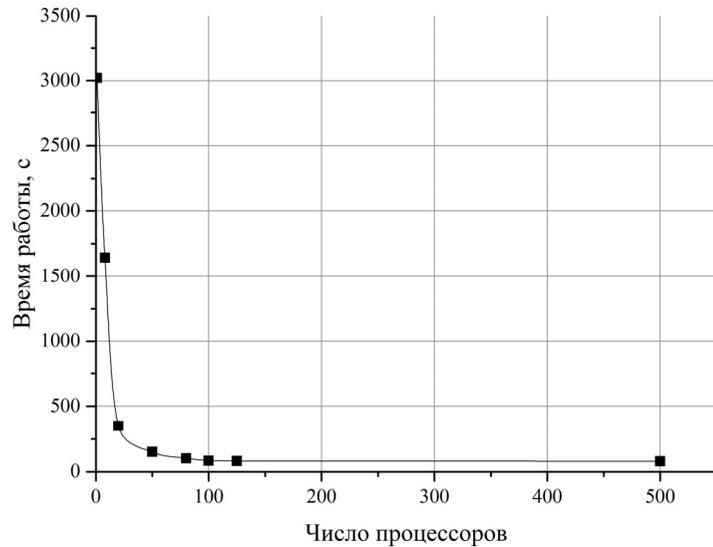
Несимметричный потенциал

Результаты

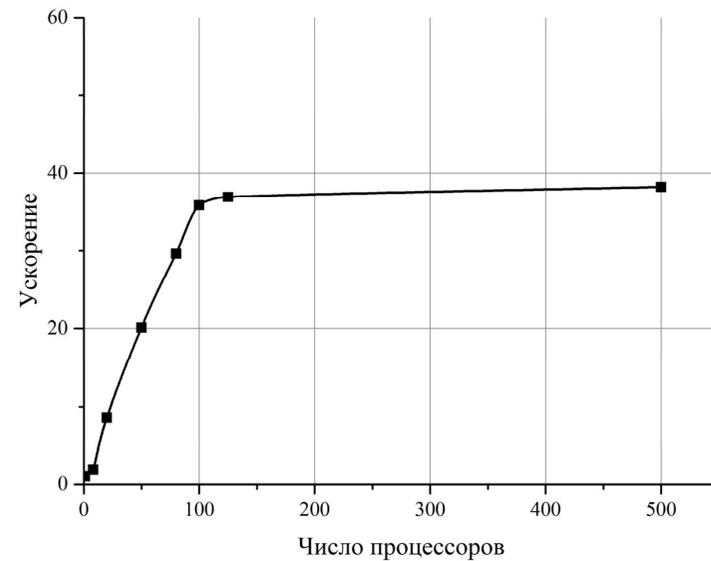


Несимметричный потенциал

Анализ результатов



На сетке 800x800: максимальное ускорение – 38 раз
время работы в пределе – 79 сек



Оптимальный размер локальной сетки: 74x74

Спасибо за внимание!
