

# Уравнение Шредингера. Прямая задача

К лекции 10 (2024)

Данные рассеяния быстроубывающего потенциала:

- дискретный спектр (отрицательные числа),
- коэффициенты пропорциональности функций Йоста в точках дискретного спектра (знакопеременные числа),
- коэффициент отражения (комплекснозначная функция вещественного аргумента).

В этой программе иллюстрируется построение функций Йоста путем численного решения УШ при помощи NDSolve. Данные рассеяния находятся приближенно сканированием решений по  $\lambda$  (точнее, по  $\kappa = \sqrt{-\lambda}$  если  $\lambda < 0$  и по  $k = \sqrt{\lambda}$  если  $\lambda > 0$ ), с достаточно мелким шагом.

Определим решение УШ с заданной асимптотикой (считая, что на концах рассматриваемого интервала потенциал уже нулевой)

```
In[1]:= xmin = -10;
xmax = 10;
lmin = -10;
lmax = 10;

nsol[λ_, x0_, as_] := NDSolveValue[{
  psi'[x] == psix[x],
  psix'[x] == (u - λ) psi[x],
  psi[x0] == (as /. x -> x0),
  psix[x0] == (D[as, x] /. x -> x0)},
  {psi[x], psix[x]}, {x, xmin, xmax}]
```

Определим не слишком плохой потенциал. Для  $\lambda < 0$  вычисляем функции Йоста убывающие на разных “бесконечностях” (равных  $\pm 10$ ) и вычисляем их вронкиан. Табулируем по  $\kappa = \sqrt{-\lambda}$  и приближенно находим точки, где вронкиан равен 0, это и есть дискретный спектр.

```
In[6]:= u = 
$$\frac{-10}{\text{Cosh}[x - 1]^2} + \frac{-3}{\text{Cosh}[x + 1]^2};$$

als = Table[
  phi1 = nsol[-kappa^2, xmin, Exp[kappa x]] /. x -> 0;
  psi2 = nsol[-kappa^2, xmax, Exp[-kappa x]] /. x -> 0;
  {kappa, Det[{phi1, psi2}] / (2 kappa)},
  {kappa, 0.02, Sqrt[-lmin], 0.01}];

spec = {};
Do[If[als[[n, 2]] * als[[n + 1, 2]] < 0,
  AppendTo[spec, 
$$\frac{\text{als}[[n, 1]] \times \text{als}[[n + 1, 2]] - \text{als}[[n + 1, 1]] \times \text{als}[[n, 2]]}{\text{als}[[n + 1, 2]] - \text{als}[[n, 2]]}],
  {n, 1, Length[als] - 1}];

-spec^2$$

```

```
Out[10]= {-0.322524, -1.8441, -3.71922, -7.6247}
```

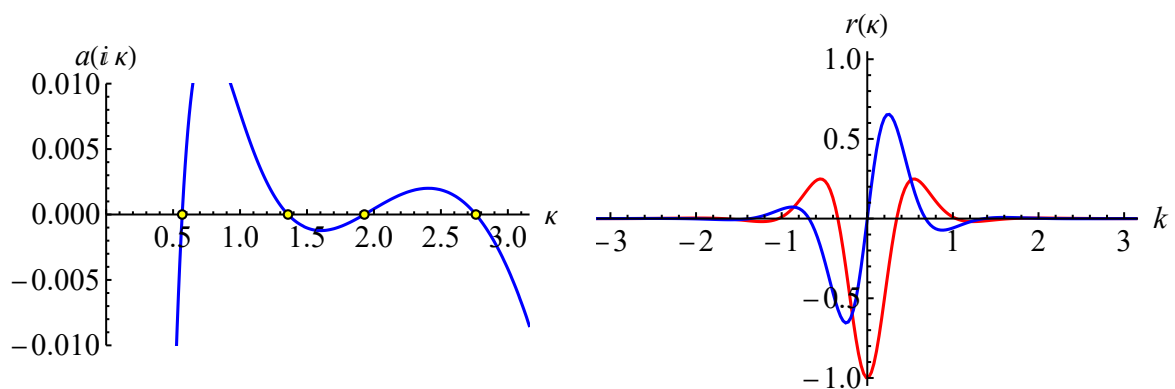
Для  $\lambda > 0$  вычисляем функции Йоста с тригонометрической асимптотикой, вычисляем матрицу перехода и по ней коэффициент отражения  $r = b/a$ . Он тоже табулируется по  $k = \sqrt{\lambda}$ .

```
In[11]:= rlist = Table[
  phi1 = nsol[k^2, xmin, Exp[-I k x]] /. x -> 0;
  psi1 = nsol[k^2, xmax, Exp[-I k x]] /. x -> 0;
  t = {phi1, Conjugate[phi1]}.Inverse[{psi1, Conjugate[psi1]}];
  t[[1, 2]]/t[[1, 1]],
  {k, -Sqrt[lmax], Sqrt[lmax], 0.03}];

klist = Table[k, {k, -Sqrt[lmax], Sqrt[lmax], 0.03}];
rerlist = Re[rlist];
imrlist = Im[rlist];

GraphicsRow[{
  ListPlot[als,
    PlotRange -> {{0, Sqrt[-lmin]}, {-0.01, 0.01}},
    Joined -> True, PlotStyle -> Blue,
    AxesLabel -> {"κ", "a(i κ)"},
    BaseStyle -> {FontFamily -> "Times New Roman", FontSize -> 16},
    Epilog -> {Black, PointSize[0.025], Point[{-#, 0}] & /@ spec,
      Yellow, PointSize[0.015], Point[{-#, 0}] & /@ spec},
    ImageSize -> 300],
  ListPlot[{Transpose[{klist, rerlist}], Transpose[{klist, imrlist}]},
    PlotRange -> {{-Sqrt[lmax], Sqrt[lmax]}, {-1.05, 1.05}},
    Joined -> True,
    PlotStyle -> {Red, Blue},
    PlotLegends -> {"Re r(k)", "Im r(k)"},
    AxesLabel -> {"k", "r(κ)"},
    BaseStyle -> {FontFamily -> "Times New Roman", FontSize -> 16},
    ImageSize -> 300]
}, ImageSize -> 700]
```

Out[15]=



Графики самих функций Йоста

```
In[16]:= Manipulate[
  If[ $\lambda \leq 0$ ,  $\kappa = \text{Sqrt}[-\lambda]$ ;
    phi1 = nsol[ $\lambda$ , xmin, Exp[ $\kappa x$ ]];
    psi2 = nsol[ $\lambda$ , xmax, Exp[- $\kappa x$ ]];
    k = Sqrt[ $\lambda$ ];
    phi1 = nsol[ $\lambda$ , xmin, Exp[-I k x]];
    psi1 = nsol[ $\lambda$ , xmax, Exp[-I k x]];
  Plot[
    Evaluate[If[ $\lambda \leq 0$ , {u, s phi1[[1]], s psi2[[1]],  $\lambda$ },
      {u, Re[phi1[[1]], Im[phi1[[1]], Re[psi1[[1]], Im[psi1[[1]],  $\lambda$ ]}],
    {x, xmin, xmax},
    PlotRange -> {{xmin - 0.1, xmax + 0.1}, {lmin - 1.1, lmax + 0.1}},
    Filling -> {1 -> {0, GrayLevel[0.5, 0.5]}},
    PlotStyle ->
      Evaluate[If[ $\lambda \leq 0$ , {Black, Blue, Red, Green}, {Black, Blue, Cyan, Red, Magenta, Green}]],
    AxesLabel -> {"x", " $\lambda$ "},
    BaseStyle -> {FontFamily -> "Times New Roman", FontSize -> 14},
    ImageSize -> 600,
    Epilog -> {{Black, PointSize[0.012],
      Point[{0, - $\#^2$ }], Yellow, PointSize[0.008], Point[{0, - $\#^2$ ]} & /@ spec}
  ],
  {{s, 50}, 1, 50, Appearance -> "Labeled"},
  {{ $\lambda$ , lmin}, lmin, lmax, Appearance -> {"Labeled", "Open"}}
]
```

Out[16]=

