第 19 题作业报告

PB18000341 范玥瑶

A. 作业题目

用 Numerov 法求解一维定态薛定谔方程在一个对称势阱（势能函数 V(x)可任意设置）中的基态和激发态的能量本征值。画出能量本征值及其附近的波函数。

$$[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)]\Psi(\mathrm{x})=\mathrm{E}\Psi(\mathrm{x})$$

B. 算法及主要公式

B.1. Numerov 算法解定态薛定谔方程

根据 Numerov 算法，

$$y_{n+1}=2y_n-y_{n-1}+h^2f_n\Psi_n+O(h^6)$$

其中h是步长，$y_n=\left(1-\frac{h^2}{12}f_n\right)\Psi_n$，$f(x)=\frac{2m}{\hbar^2}[V(x)-E]$.

因此递推公式为：

$$y_{n+1}=2y_n-y_{n-1}+h^2f_n\Psi_n$$

对称势阱中波函数$\Psi(x)$是奇宇称或偶宇称的，因此可以只求 x>0 的部分。

当$\Psi(x)$是奇宇称的，$\Psi(0)=0$，$\Psi'(0)\neq 0$，由于递推的差分方程是线性的，不妨取$\Psi'(0)=1$，计算得到结果之后再进行归一化。由差分表达式$\Psi_n'=\frac{\Psi_{n+1}-\Psi_n}{h}$可得$\Psi_1=1$，即取$\Psi_0=0$，$\Psi_1=1$。利用对称性$\Psi(x)=-\Psi(-x)$可以得到负半轴上的函数值。

当$\Psi(x)$是偶宇称的，$\Psi'(0)=0$，为了开始积分取$\Psi(0)\neq 0$，由于递推的差分方程是线性的，不妨取$\Psi(0)=1$，计算得到结果之后再进行归一化。由差分表达式$\Psi_n'=\frac{\Psi_{n+1}-\Psi_n}{h}$可得$\Psi_1=1$，即取$\Psi_0=\Psi_1=1$。利用对称性$\Psi(x)=\Psi(-x)$可得负半轴的函数值。

B.2. 打靶法求能量本征值

一般先根据物理情境求出一个能量估计值，取估计值从 x=0 求 x=±L 处波函数值，判断是否满足束缚态边界条件$\Psi(\pm L)=0$，进而判断估计值是偏大还是偏小：当 x 足够大时若 x→+∞则 E 过小，若 x→-∞则 E 过大。则可以类似二分法设定能量上下限进行求解。

根据量子力学知识，束缚态能量$E>\min V(x)$，因此根据势能函数可以给定一个范围，取定 E 的步长，对其中的 E 从小到大逐一利用 Numerov 法求定态薛定谔方程。在设定的 x 的边界$x=\pm L$处检验是否满足束缚态边界条件$\Psi(\pm L)=0$，如果满足则 E 是能量本征值，否则不是。满足条件的最小 E 是基态的能量本征值，此后的是激发态的能量本征值。

对于无限深方势阱$V(x)=\begin{cases}0\,, & |x|<a\\ +\infty\,, & |x|>a\end{cases}$，边界条件中的 L=a；对于其他势，如简谐势，则取一个较大的 L 以控制 E 的误差。比较理想的情况是误差和计算机舍入误差相当；具体方法是不断增大 L 进行校验直到求出的 E 基本稳定。

B.3. 算法

取 L=π 的无限深方势阱进行计算。薛定谔方程写作：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(\mathrm{x})=\mathrm{E}\Psi(\mathrm{x})\text{，}|x|<\pi$$

将薛定谔方程无量纲化，取 x 是粒子位置用米作单位的数值，$f(x)=-\frac{2mE}{\hbar^2}=Const$，求本征值时直接对其进行试探，最后输出本征值时再转换成 E，方程：

$$\frac{d^2}{dx^2}\Psi(\mathrm{x})=\mathrm{f(x)E}\Psi(\mathrm{x})\text{，}|x|<\pi$$

由$f(x)=f=Const$，$y_{n+1}=2y_n-y_{n-1}+h^2f_n\Psi_n$，$y_n=\left(1-\frac{h^2}{12}f_n\right)\Psi_n$得递推公式：

$$\Psi_{n+1}=\frac{24+10*h^2*f}{12-h^2*f}\Psi_n-\Psi_{n-1}$$

因为数值计算存在误差，所以应当先对Ψ进行归一化再判断是否取到了能量本征值。由量子力学知识，能量本征函数可以取成实函数，归一化条件写成：

$$1=\int_{-\pi}^{\pi}\psi^2(x)\,dx$$

离散化，归一化的波函数$\psi(x)=\frac{\Psi(x)}{A}$，$A=\sqrt{2\hbar\sum_{n=0}^{N-2}\Psi_n^2}$，N 是分割点的数目，N-1 是区间[0，π]被分成的份数。是否是能量本征值的判断标准是，$A^{-1}*\Psi(\pi)=0$

算法如下：

取无量纲化能量最大值 0，最小值-10，步长取 0.1，在主函数中以循环语句调用子函数 TISE 进行求解并输出本征值及对应的波函数（离散的）。

TISE 的算法是：取偶宇称初始条件$\Psi_0=\Psi_1=1$，调用子函数 check 在$x\in[0，3.1416]$计算x_i及其对应的偶宇称Ψ_i，保存在全局变量数组 psi[N]中。若$A^{-1}*\Psi(\pi)=0$则 f 对应的 E_n 是能量本征值，由于 h 太小，$E=-\frac{\hbar^2}{2m}f$不能输出，直接在屏幕上输出 f，创建文件"n_even.txt"，其中 n 是能量本征值的编号。由$\Psi(x)=\Psi(-x)$，依次输出 [-3.1416，3.1416]中x_i及其对应的偶宇称Ψ_i。

再取奇宇称初始条件$\Psi_0=0$，$\Psi_1=1$，调用子函数check 进行奇宇称情形的计算，若$A^{-1}*\Psi(\pi)<\varepsilon$则 f 对应的 E_n 是能量本征值，直接在屏幕上输出 f，创建文件"n_even.txt"，其中 n 是能量本征值的编号。由递推公式和$\Psi(\mathrm{x})=-\Psi(-\mathrm{x})$，依次求出[-3.1416，3.1416]间所有的x_i对应的奇宇称Ψ_i，一同输出到文件"n_odd.txt"。

当 E 是本征值时 n 自增。

子函数 check 的算法是：全局数组 psi 中预设Ψ_0，Ψ_1，取步长 $\mathrm{h}=1\mathrm{E}-5$，则 N=314161，根据递推公式

$$\Psi_{n+1}=\frac{24+10*h^2*f}{12-h^2*f}\Psi_n-\Psi_{n-1}$$

计算Ψ_i，保存在全局变量数组 psi[N]中。

以上可以求出 0 到$10\frac{\hbar^2}{2m}$之间的所有能量本征值。

C. 计算结果及具体分析、讨论

C.1. 计算结果

取ε=0.01 求出能量本征值$E_1=\frac{\hbar^2}{2m}$，$E_2=4\frac{\hbar^2}{2m}$，$E_3=9\frac{\hbar^2}{2m}$，对应的波函数均为奇宇称，作对应的波函数图像如图 1-3.

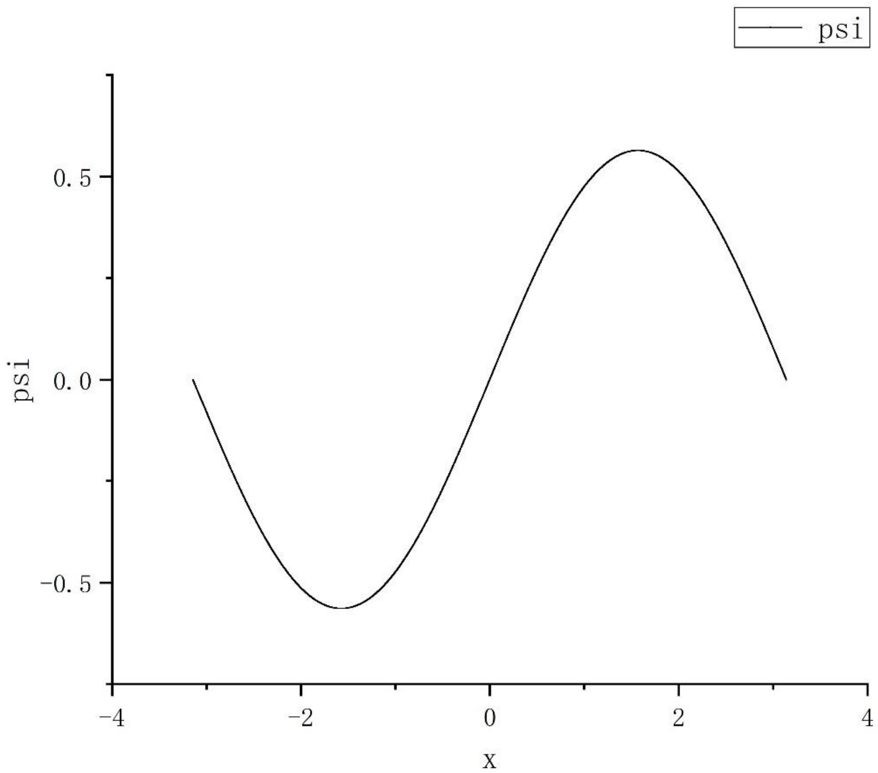

图1 本征值E1对应波函数图像

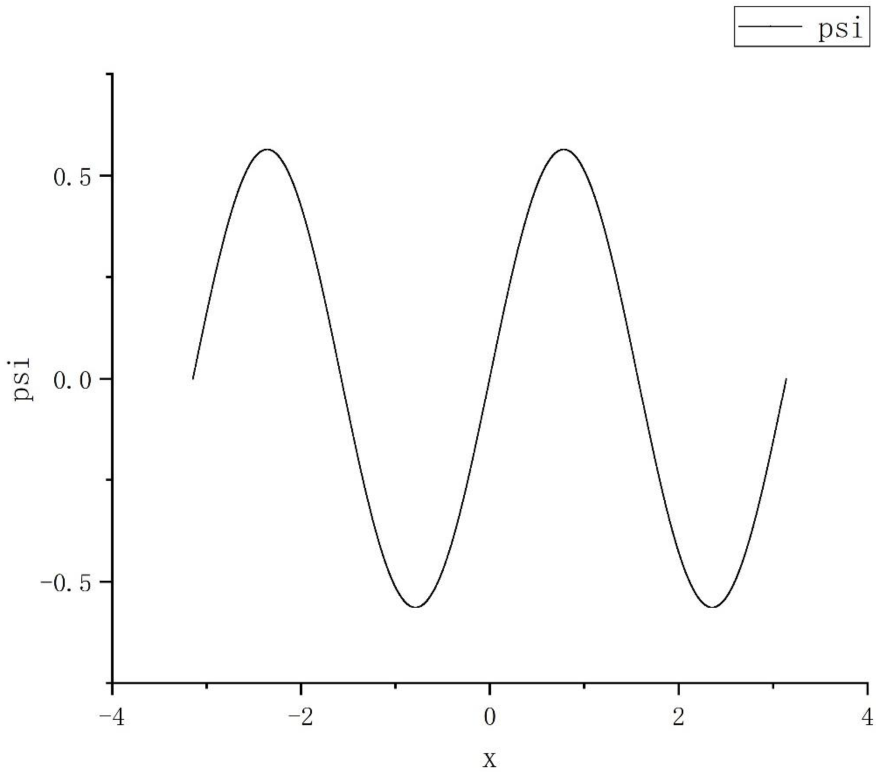

图2 本征值E2对应波函数图像

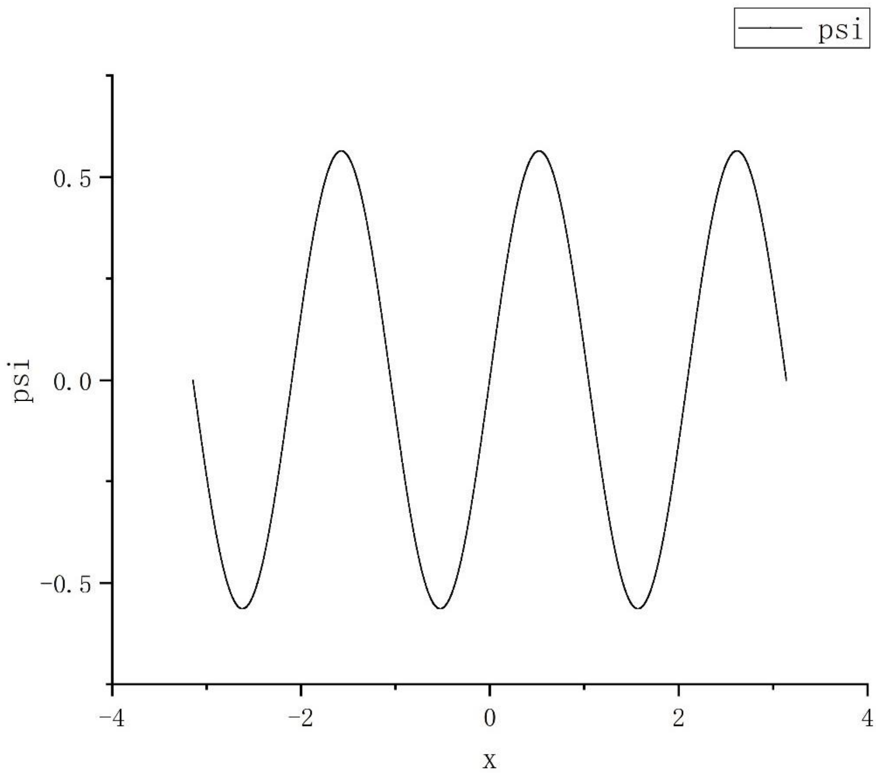

图3 本征值E3对应波函数图像

其中$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \approx 6.10 \times 10^{-39} J \approx 3.8 * 10^{-20} eV$是基态能量，$E_2 = \frac{2\hbar^2}{m} \approx 1.5 * 10^{-19} eV$，

$E_3 = \frac{9\hbar^2}{2m} \approx 3.4 * 10^{-19} eV$是激发态能量。

C.2. 误差分析

波函数理论上是正弦函数或余弦函数。图像基本符合。

根据理论推导，$E \in [0，10 * \frac{\hbar^2}{2m}]$应当有交错出现、宇称相反的本征态，分别对应能量$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(N + \frac{1}{2}\right)^2$（N=0，1，2，偶宇称）和$E = \frac{\hbar^2}{2m}N^2$(N=1，2，3，奇宇称)。以下计算最接近$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(N + \frac{1}{2}\right)^2$的 4 个被取到的 E 值，改编程序，将对应 f 代入子函数 check 计算得到$\psi(\pi) \approx \Psi(3.1416)/A$，对比求出更接近束缚态的 f，得到没有输出奇宇称波函数的原因。

N=0 时$f = -\frac{1}{4} = -0.25$，本题的程序 TISE 中最接近它的两个 f 分别是-0.2 和-0.3；N=1 时$f = -\frac{9}{4} = -2.25$，本题的程序 TISE 中最接近它的两个 f 分别是-2.2 和-2.3；N=2 时$f = -\frac{25}{4} = -6.25$，本题的程序 TISE 中最接近它的两个 f 分别是-6.2 和-6.2；运行程序 evencheck 得到$\psi(\pi)$如表 1.

f	$\psi(\pi)$
-0.3	-0.088133
-0.2	0.088164
-2.3	0.029528
-2.2	-0.029525
-6.3	-0.017724
-6.2	0.017718

表 1 evencheck 计算结果

从 f=-0.3 变成 f=-0.2,从 f=-2.3 变成 f=-2.2 和从 f=-6.3 变成 f=-6.2 时$\psi(\pi)$均变号，证明有本征值存在，由于 f=-0.2 和 f=-0.3,f=-2.2 和 f=-2.3、f=-6.3 和 f=-6.2 时$\psi(\pi)$和 0 的差距$|\psi(\pi)|$都比较接近，优劣无从判断，而理论上偶宇称波函数是余弦函数，由对称性可以推测合适的 f 应当在区间中点 f=-0.25，f=-2.25，f=-6.25，则计算结果与理论相符。没有被识别的原因是步长过小漏了，应当使用打靶法在[-6.3，-6.2]，[-2.3，-2.2]，[-0.3,-0.2]内分别细化。

补充计算$f = -0.25$，$f = -2.25$和$f = -6.25$的波函数，作函数图像如图 4~6. 当$f = -0.25$时$\psi(\pi) = 5E - 6$，当$f = -2.25$时$\psi(\pi) = 3E - 6$，当$f = -6.25$时$\psi(\pi) = -4E - 6$，都在原判准可以判断的范围内。因此是步长不足的问题。

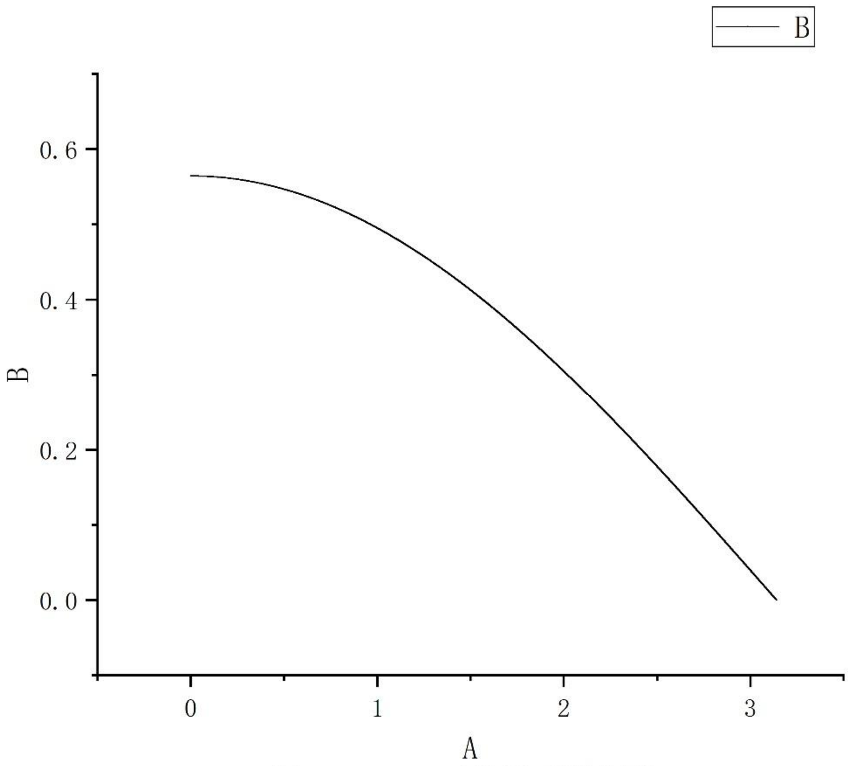

图4 f=-0.25时的波函数图像

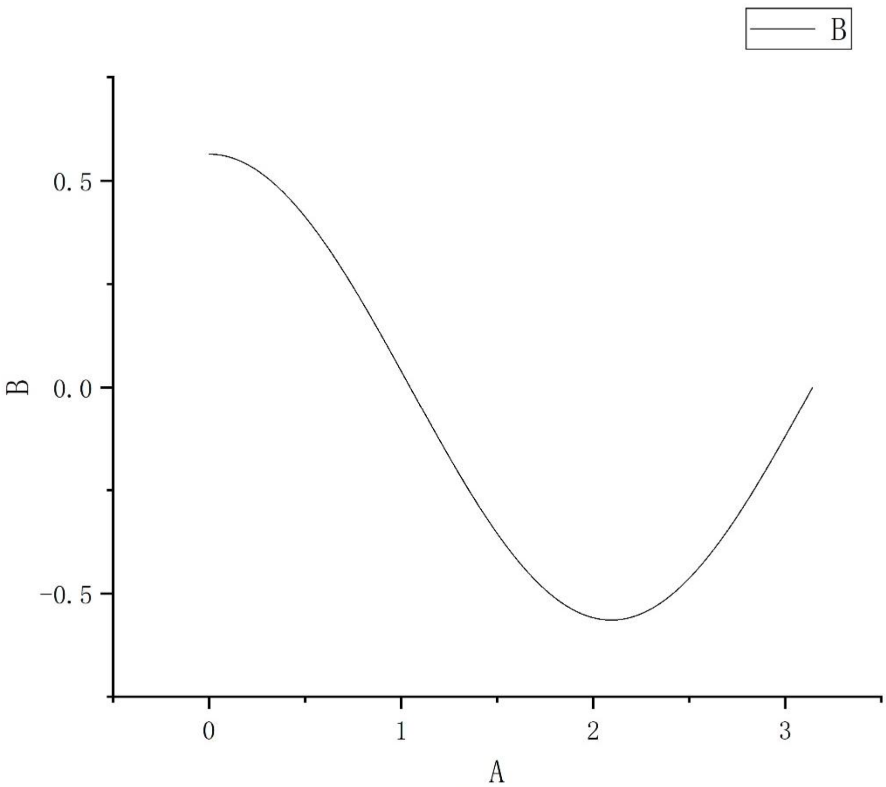

图5 f=-2.25时波函数图像

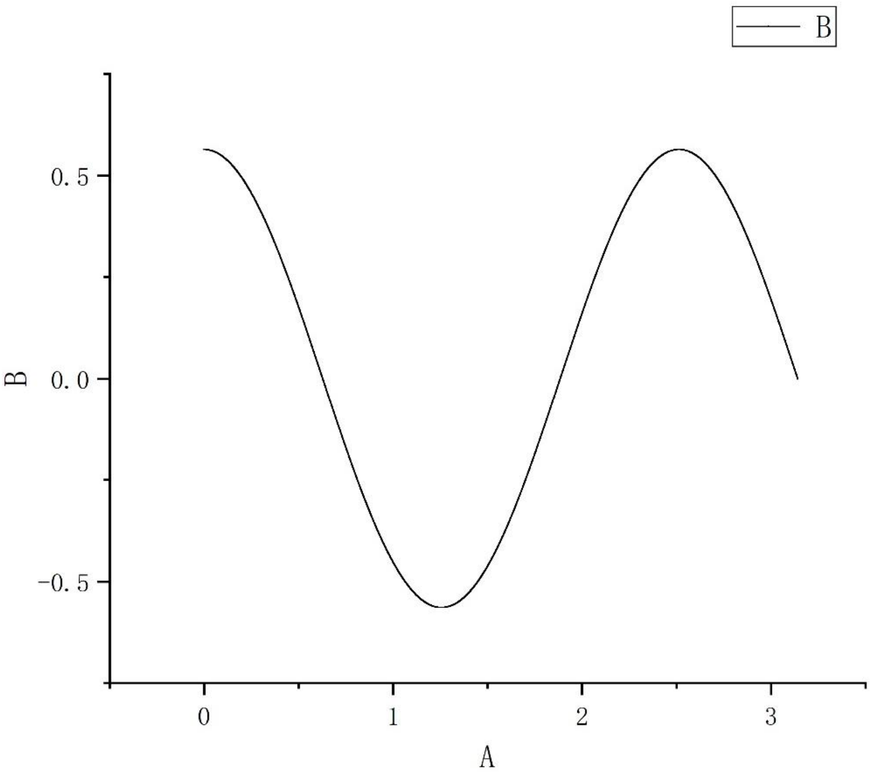

图6 f=-6.25时的波函数图像

修改程序ε=1E-5，步长 step=0.05 后重新运行。得到宇称，$\psi(\pi)$和能量本征值如表 2：

宇称	$\psi(\pi)$	能量本征值/$\frac{\hbar^2}{2m}$
奇	-0.000013	9.000000
偶	-0.000004	6.250000
奇	0.000008	4.000000
偶	0.000003	2.250000
奇	-0.000004	1.000000
偶	-0.000005	0.250000

表 2 新程序运行结果

和理论一致。

D. 总结

本次作业中学生编写程序计算了定态薛定谔方程[0，$10\frac{\hbar^2}{2m}$]之间的能量本征值和对应的能量本征态，画出来波函数图像。初步运行程序后和由量子力学知识推导的精确解对比，分析了误差来源，提出可以用打靶法进行细化，最终通过手动调节步长得到了符合理论的解。