

差分方法求解薛定谔定态方程

何翼成 *

April 4, 2022

Project 1

一 题目分析

数值求解一维定态薛定谔方程 $(\hbar = 1)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x)\phi(x) = \varepsilon \phi(x),$$

取 $m=1$, $V(x)=0.5x^2+0.1x^4$, 在 $-4 < x < 4$ 的范围内, 画出基态波函数随空间的分布, 同时求出基态能量

Figure 1: 题目总览

由课上知识可知, 为了求解微分方程, 我们对该方程进行差分即可得到 $-\frac{\psi_{i+1}-2\psi_i+\psi_{i-1}}{2\delta x^2} + V(x)\psi_i = E\psi_i$, 其中代入 $V(x) = \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{10}$ 即可。我们可以看到, 这一系列的方程具有相似的结构, 而 Matlab 擅长于矩阵的数值处理, 我们便可以利用矩阵的思想进行便捷的计算。

二 代码展示

```
1 clear;clc;
2 X=4;%长度
3 N=1000;%格点数
4 dx=2*X/N;%步长
5 x=linspace(-X,X,N);
6 V=1/2*x'.^2+0.1*x'.^4;%一维势场
7 A=spdiags(V,0,N,N);%提取V的对角线并且生成矩阵
8 H=zeros(N,3);%哈密顿算符
```

*学号:520072910043;
邮箱地址: heyicheng@sjtu. edu. cn

```

9   H(:,1)=-0.5/dx^2;
10  H(:,2)=1/dx^2;
11  H(:,3)=-0.5/dx^2;
12  B=spdiags(H,-1:1,N,N);
13  C=A+B;
14  E=1;%能级数
15  [Vector,Value]=eigs(C,E,0);
16  %画图
17  for i=1:E
18      psi=Vector(:,i);
19      if i>1
20          subplot(3,3,i)
21      end
22      plot(x,psi.^2/sum(psi.^2*dx))
23      ylim([0,1])
24      xlabel('x');ylabel('P')
25  end

```

由此可以观察得到的图像进行简要分析，从而得到所需要的初始条件和方程参数。

三 结果分析与结论

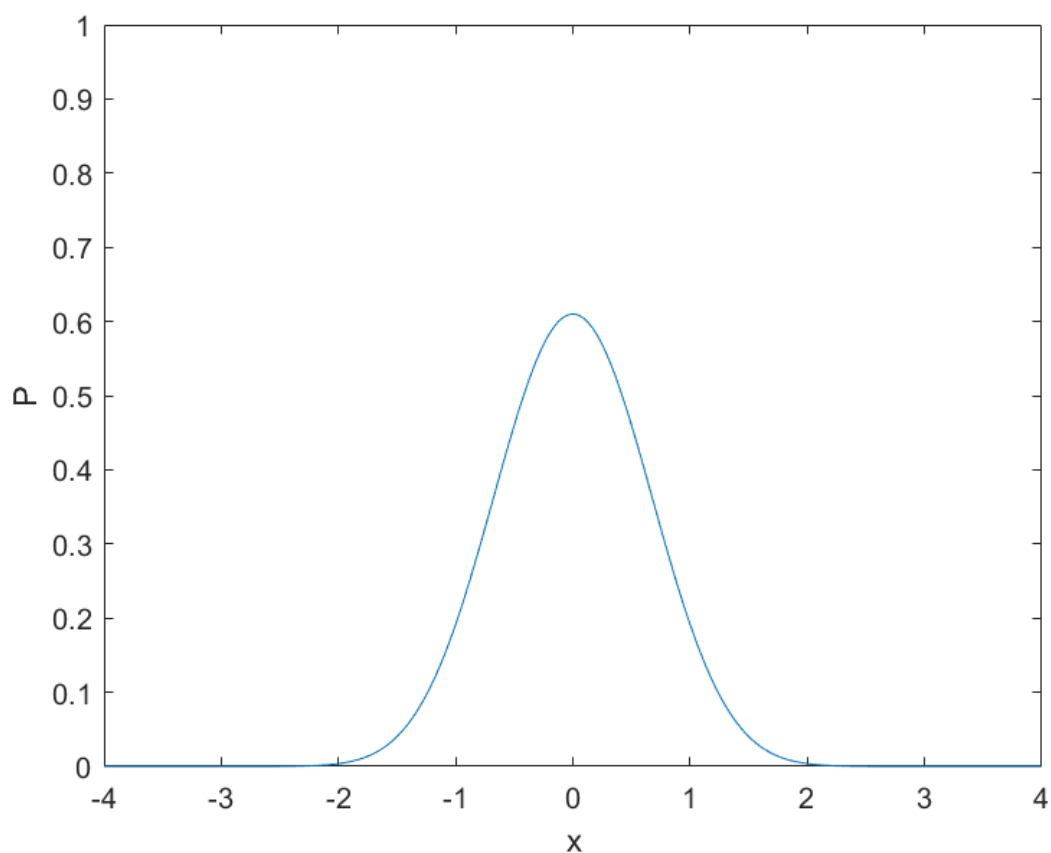


Figure 2: 求解得到的波函数图像

观察工作区里的数据，我们可以看到计算得出的能量本征值为 0.559752150548532。