定态 Schrodinger 方程的数值解法

钮博恒*1)

*（兰州大学物理科学与技术学院，兰州 730000）

摘要 量子力学是为了描述微观粒子运动状态和机制的物理学分支，由最初的黑体辐射问题引出。经典物理学不能解释黑体辐射光谱的实验结果，瑞利和金斯使用玻尔兹曼分布和经典电动力学所解出的ν-ρ曲线与实验严重不符会在高频段出现“紫外灾难”。而维恩得到的曲线则在低频段与试验相差较大，有系统误差。为了解决这个问题，普朗克提出了能量子的概念，认为黑体吸收和辐射的能量值是离散的，而不是连续的，它有一个最小的单位$h\nu$。量子概念的引入可以很好地与试验相吻合，同时也导致了物理学的一次重大革命。为了更好地描述微观粒子的行为和运动状态（比如氢原子光谱的分立谱线），玻尔，玻恩，薛定谔，海森堡，德布罗意等物理学家提出了一些模型和方法来发展理论。根据德布罗意物质波的思想，薛定谔提出了与这个思想对应的薛定谔方程，该方程是一个波动方程形式为$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+U(x,t)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$，得到的解称为波函数。当方程右侧为一定值$E$乘波函数ψ时，为“定态薛定谔方程”。本文给出定态 Schrodinger 方程的数值解法

关键词 Schrodinger 方程，Numerove 法，常微分方程数值解法，打靶法，本征值数值解法

SCHRODINGER EQUATION AND NUMERICAL METHOD

Niu Boheng*1)

*(*School of Physical Science and Technology Lanzhou University*，*Lanzhou* 730000，*China*)

Abstract Quantum mechanics is a branch of physics in order to describe the movement state and mechanism of microscopic particles. Classical physics cannot explain the experimental results of blackbody radiation spectrum. The curves solved by Boltzmann distribution and classical electrodynamics are not consistent with the experiment. In order to solve this problem, Planck proposed the concept of energetic energy. He believed that the energy values of black body absorption and radiation are discrete, not continuous. The introduction of the quantum concept fits well with experiments, and has also led to a major revolution in physics. In order to better describe the behavior and motion of microscopic particles (such as the discrete lines of the hydrogen atom spectrum), physicists such as Bohr, Born, Schrödinger, Heisenberg, De Broglie, etc. have proposed some models and methods to Development theory. According to De Broglie's idea of matter waves, Schrodinger proposed a Schrodinger equation corresponding to this idea, which is a wave equation of the form. This paper gives a numerical solution of the stationary Schrodinger equation

Key words Schrodinger equation，Numerove method，ODE，numerical method，target method

引　言

以下分别介绍定态薛定谔方程的推导，如何用 Numerove 法解这类特殊的常微分方程，Numerove 法的反向积分形式，打靶法求解本征值，定态薛定谔方程的矩阵解法，其中包含了追赶法，三对角矩阵的本征值解法等。

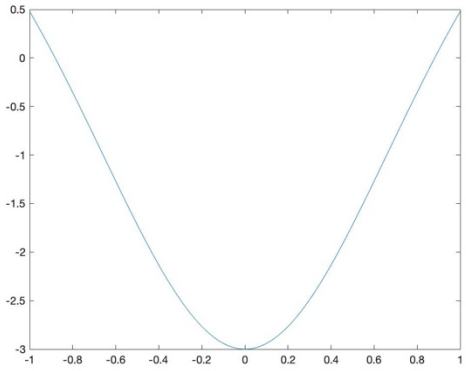
1　定态薛定谔方程的推导

先看最简单的情形，一维定态薛定谔方程。为了问题进一步简化，给出的势能在一定区间的两个端点出为无穷大，可以使波函数的值在两端点为 0。即$V(x_{\max})=\infty, V(x_{\min})=\infty$。一维定态薛定谔方程及其边界条件为：

$$\frac{d^2\psi}{dx^2}+k^2(x)\psi(x)=0$$

$$\psi(x_{\min})=\psi(x_{\max})=0$$

$$k^2(x)=\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]$$



接下来将方程无量纲化，令$V(x)=V_0 v(x)$，得到无量纲化后的方程：

$$\left[-\frac{1}{\gamma^2}\frac{d^2}{dx^2}+v(x)-\varepsilon\right]\psi(x)=0$$

我们研究这样的势井$\mathrm{V}=3-\mathrm{A}^2\mathrm{B}(\mathrm{B}-1)/cosh(Ax^2)/2$。如右图可以从简单问题的解析解中得到：在$E>V$的经典区域，波函数是震荡的解，在$E<V$的经典禁区，波函数是指数衰减的。

2　打靶法数值求解能量本征值

2.1 打靶法概述

对于定态薛定谔方程，如果将等式左侧的微分算符和势能算符之和看做一个线性厄米算符，实际方程将是一个本征值问题。我们使用打靶法。打靶法的基本流程是：先猜测一个本征值，将本征值问题化为一个常微分方程的边值问题，使用直接积分的方法，解出该边值问题的解，并与边界条件作比较，当误差大于给定值的时候，重复以上步骤，直到得到满足边界条件的本征值。在这里我们还需要解决：积分的边界问题，这个我们用二分法求$E-V=0$的根来解决。对于直接积分法，我们使用 Numerove 法。

2.2 二分法求根

先定义势函数，然后定义二分法求$E-V=0$的较小的根的函数：

```
function potential = VX(x)
A = 1;
B = 4;
potential = 3-A.^2.*B.*(B-1)./(cosh(A.*x).^2)./2;
function xm = findroot(E)
A = 1;
B = 4;
f = @(x)3-A^2*B*(B-1)/(cosh(A*x)^2)/2-E;
x = -1;
dx = 0.5;
fx0 = f(x);
err = 1e-6;
i = 0;
```

```
while (dx>err)
    i = i+1;
    x = x+dx;
    if fx0*f(x)<0
        x = x-dx;dx = dx./2;
    end
    xm = x;
end
```

2.3Numerove 积分

定义正向积分的Numerove函数：

```
function U=numerove(N, H, Q, S,U)
%N为步数
%H为步长
%Q为k^2(x)
%S为驱动项
%U为函数组数组(方程解)
%G为h^2/12
  G = H*H/12.0;
  for I = 2:1:N-1
    C0 = 1.0+G.*Q(I-1);
    C1 = 2.0-10.0.*G.*Q(I);
    C2 = 1.0+G.*Q(I+1);
    D  = G.*(S(I+1)+S(I-1)+10.0*S(I));
    UTMP = C1*U(I)-C0*U(I-1)+D;
    U(I+1) = UTMP/C2;
  end
end
```

然后定义反向积分的Numerove函数：

```
function U=numerove_inv(N, H, Q, S,U)
%N为步数
%H为步长
%Q为k^2(x)
%S为驱动项
%U为函数组数组(方程解)
%G为h^2/12
  G = H*H/12.0;
  for I = N-1:-1:2
    C0 = 1.0+G.*Q(I-1);
    C1 = 2.0-10.0.*G.*Q(I);
    C2 = 1.0+G.*Q(I+1);
    D  = G.*(S(I+1)+S(I-1)+10.0*S(I));
    U(I-1) = (D+C1.*U(I)-C2.*U(I+1))./C0;
  end
end
```

这两个Numerove函数的定义，只是为了后续积分的调用与实现，接下来定义函数所需要的各个输入，以调用积分，又因为在$E-V=0$的第一个根处是、正反向积分的边界，而在“打靶”的过程中，我

们需要不断更新这个边界，积分函数也应该有一个输入值也就是根$xturn$。综上，写出真正的积分函数，它的返回值是数组xl或xr，以及解ul或ur。

```
function [xl,ul] = int_left(xturn)
% global tol;
global C;
global e1;
nl = 1000;
xl = linspace(-1,xturn,nl);
hl = xl(2) - xl(1);
ul = zeros(1,nl);
ul(1) = 0;
ul(2) = 0+0.0001;
ql = zeros(1,nl);
for i = 1:nl
    ql(i) = C.*(e1-VX(xl(i)));
end
sl(1:nl) = 0;
ul = numerove(nl,hl,ql,sl,ul);

function [xr,ur] = int_right(xturn)
% global tol;
global C;
global e1;
nr = 1000;
xr = linspace(xturn,1,nr);
hr = xr(2) - xr(1);
ur = zeros(1,nr);
ur(nr) = 0;
ur(nr-1) = 0+0.0001;
qr = zeros(1,nr);
for i = 1:nr
    qr(i) = C.*(e1-VX(xr(i)));
end
sr(1:nr) = 0;
ur = numerove_inv(nr,hr,qr,sr,ur);
```

2.4 衔接处判断

要判断循环合适停止，其依据是从左向右积分曲线在边界点$xturn$处的导数值，和从右向左积分曲线在边界点$xturn$处的导数值其差值是否在允许范围内。那么需要定义求导数的函数。对于从左向右积分的曲线，定于后向差商公式更好，对于另一支，选择前向差商更好。

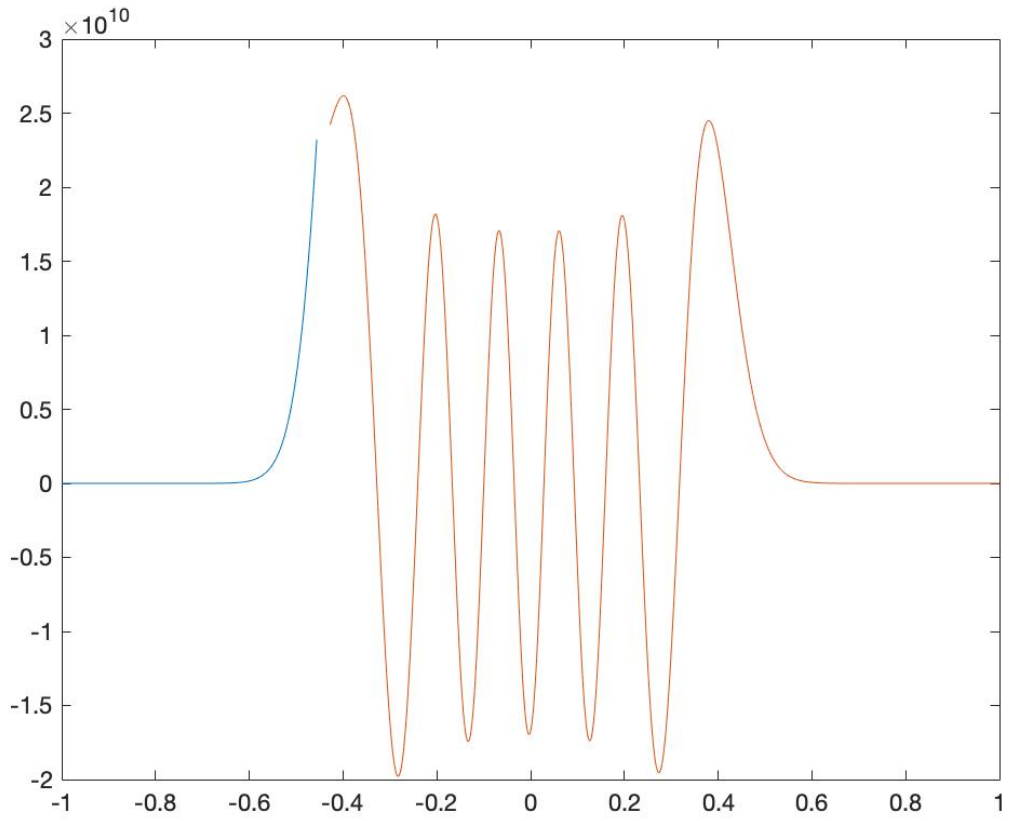
```
function du = du_backward(xl,ul)
h = xl(2) - xl(1);
du = (1/2*h)*(ul(1000-2)-4*ul(1000-1)+3*ul(1000));

function du = du_forward(xr,ur)
h = xr(2) - xr(1);
```

```
du = (1/2*h)*(-ur(3)+4*ur(2)-3*ur(1));
```

2.5 主函数

至此已近完成了所有的准备工作，写出主函数。

```
%%
clc;clear all;
global e1;
global C;
global tol;

tol = 1e-9;
e1 = -2.1;
de = 0.001;
C = 50^2;%所有的常数化与此
xturn = findroot(e1);%二分法求根

[xl,ul] = int_left(xturn);%从左向右积分
[xr,ur] = int_right(xturn);%从右向左积分

dul = du_backward(xl,ul);
dur = du_forward(xr,ur);%判断导数值
f0 = dul(end)-dur(1);%第一次判断

while abs(de)>tol
    e1 = e1+de;%改变猜测值
    xturn = findroot(e1);%第一个根
    [xl,ul] = int_left(xturn);
    [xr,ur] = int_right(xturn);%再次积分
%     dul = diff(ul)./diff(xl);
%     dur = diff(ur)./diff(xr);
    dul = du_backward(xl,ul);
    dur = du_forward(xr,ur);
    f1 = dul(end) - dur(1);
    if(f0*f1<0)
        e1 = e1 - de;
        de = de/2;
    end
end
plot(xl(1,1:950),ul(1,1:950),xr,ur);

disp(e1);
disp(dul);
disp(dur);
```



输出最终的导数值和能量本征值：

-2.0247e+00——E

2.1037e+05——dul

2.1037e+05——dur

可以看到，最终导数值已近基本相等。但是由于在两个积分函数中xl和xr各选取了 1000 个格点，在边界点处没能完全连接，这不影响结果。

3 Schrodinger 方程的矩阵解法

将 Schrodinger 方程离散化，可以得到：

$$-\frac{1}{h^2}(\varphi_{i-1}+\varphi_{i+1}-2\varphi_i)+V_i\varphi_i=\varepsilon\varphi_i$$

应用于每一个格点，则得到：$H\ \varphi=\varepsilon\varphi$。解微分方程化为一个求矩阵本征值的问题。由于矩阵 H 是一个三对角对称矩阵，根据求本征值的一般方法，要求$det|H-E|=0$即特征多项式的根。可以确定多项式为：

$$P_1(\lambda)=A_{11}-\lambda$$

$$P_2(\lambda)=(A_{22}-\lambda)P_1(\lambda)-A_{12}^2$$

$$P_n(\lambda)=(A_{nn}-\lambda)P_{n-1}(\lambda)-A_{n,n-1}^2P_{n-2}(\lambda)$$

由于是一个递推式，由循环得出最终的多项式，并且做成函数：

```
function ppp = ppp(lambda,n,A)
p = zeros(1,n);
p(1) = A(1,1)-lambda;%p0
p(2) = (A(1,1)-lambda)*p(1)-A(2,1)^2;%p1
for i = 3:n
   p(i) = (A(i,i)-lambda)*p(i-1)-A(i,i-1)^2*p(i-2);
end
```

```
ppp = p(end);
```

再次使用二分法求根，函数如下：

```
function lambda = search(n,A)
lambda = -10;
dlam = 0.1;
ppold = ppp(lambda,n,A);
while abs(dlam)>0.0001
    lambda = lambda + dlam;
    if ppp(lambda,n,A)*ppold<0
        lambda = lambda-dlam;
        dlam = dlam/2;
    end
end
end
```

由循环给出矩阵 H 的形式并调用*search*函数搜索本征值：

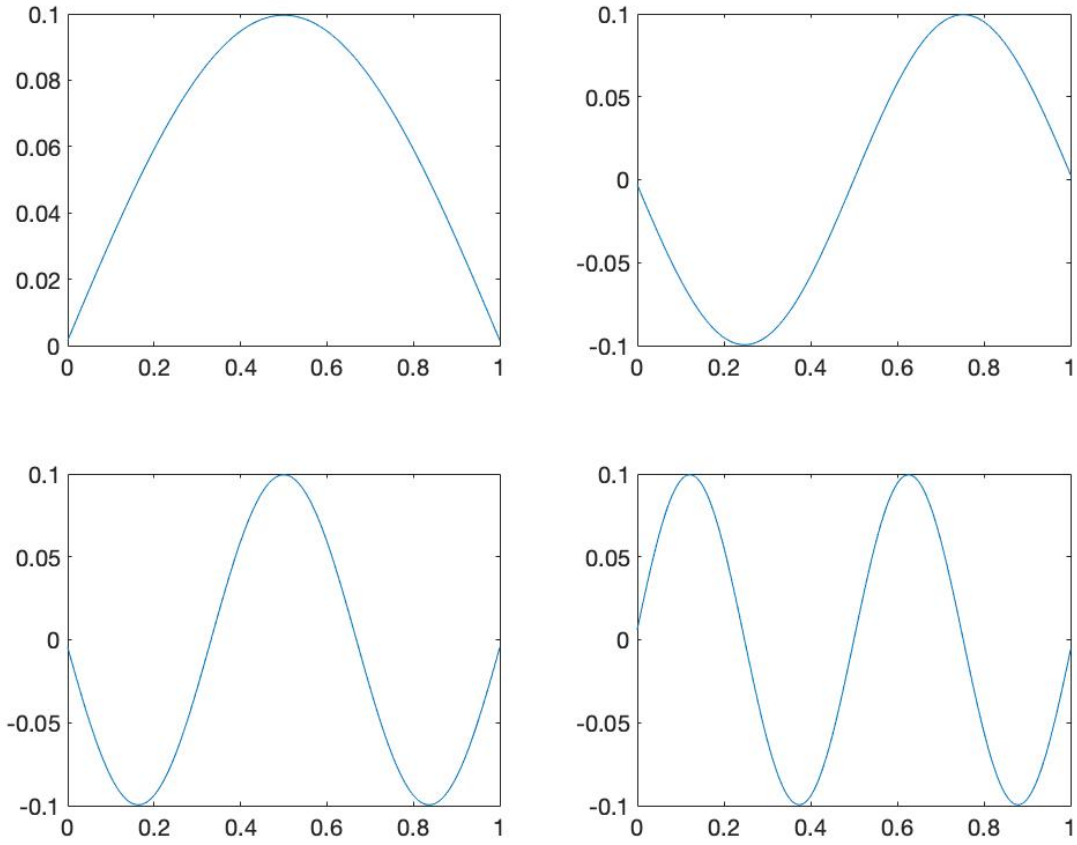
```
% function phi = sol_of_matrix
x = -1:0.1:1;
C = 50;
V = (1/C).*VX(x);
h = x(2) - x(1);
N = length(x);

A = zeros(N,N);
for i = 1:N
    A(i,i) = -(2/h*h)+V(i);
end

for i = 2:N
    A(i,i-1) = -1/h^2;
end

for i = 1:N-1
    A(i,i+1) = -1/h^2;
end

a = search(N,A);
disp(a);
```

得到最终的值为：-2.0275e+00，与打靶法求出的值相近。原则上，可以通过多次循环，猜测出多个（完整的为 N 个）本征值，并由三对角矩阵的追赶法求出本征函数。

```
function x = chase(a,b,c,f)
N = length(f);
x = zeros(1,N);
y = zeros(1,N);
% d = zeros(1,N);
u = zeros(1,N);
```

```
y(1) = f(1)/b(1);
d = b(1);
for i = 2:N
    u(i-1) = c(i-1)/d;
    d = b(i)-a(i)*u(i-1);
    y(i) = (f(i)-a(i)*y(i-1))/d;
end
x(N) = y(N);
for i = N-1:-1:1
    x(i) = y(i)-u(i)*x(i+1);
end
```

我们使用函数eig得到所有的本征值，本征函数一下给出前四个本征函数：



参考文献

1 彭芳麟，计算物理基础，北京，高等教育出版社 2010