计算物理第19题

PB18000039 徐祺云

一　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。

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

二　算法及主要公式

Numerov法简述

Numerov方法专用于求解如下形式的二阶微分方程：

$$\psi''=F(\phi,x)=f(x)\psi(x)$$

对于一维定态不含时的薛定谔方程，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\psi(x)=E\psi(x)\Rightarrow\psi''(x)=\frac{2m(V-E)}{\hbar^2}\psi(x)$$

记 $f(x)=\frac{2m(V(x)-E)}{\hbar^2}$，并做变量代换 $y(x)=\left[1-\frac{h^2f(x)}{12}\right]\psi(x)$，可以得到$O(h^6)$精确度的算法递推式：

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

对称势阱性质

考虑对称势阱，这里我取一维无限深方势阱作为研究对象，即

$$V(x)=\begin{cases}0 & ,-L<x<L\\ \infty & ,otherwise\end{cases}$$

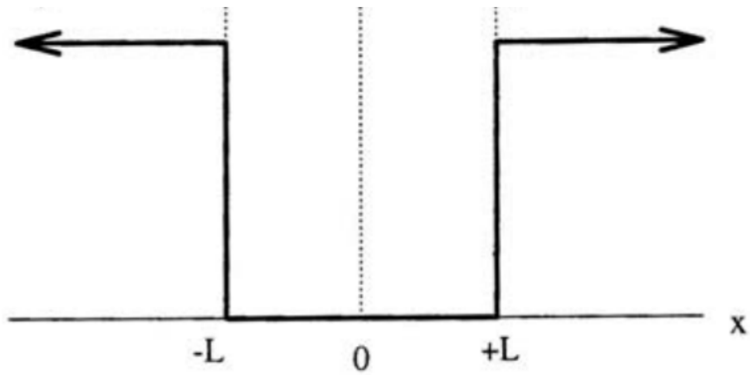

图 1: 一维无限深方势阱

其波函数要么对称$\psi(-x)=\psi(x)$，要么反对称$\psi(-x)=-\psi(x)$。由于差分方程的线性性，可以对偶宇称设定初始值$\psi_0=\psi_1=1$，奇宇称设定初始值$\psi_0=0,\psi_1=1$。

打靶法求解

输入一个能量的范围，然后输入想要的宇称类型(0代表偶宇称，1代表奇宇称)，利用二分法进行求解：

对于每一个确定的能量值E，从ψ_0,ψ_1出发可以得到y_0,y_1，继而得到$y_2,...,y_n$，从而得到ψ_n。

在右边界处，若当前能量区间$[E_l,E_r]$得到的ψ_{nl}和ψ_{nr}异号，说明区间中含有符合物理上满足边界条件$\psi(x=L)=0$的解，继续二分法求解即可。

三　计算结果与分析

取方势阱 $L=1$，步长$h=0.0001$，为使得结果看起来更加直观，不妨取单位化常数，即记质量$m=1$，普朗克常数$\hbar=1$(这样设定不妨碍我们对问题的研究求解)，则 $f(x)=\frac{2m(V(x)-E)}{\hbar^2}=2(V(x)-E)$

取初始能量区间$[1,2]$，偶宇称，结果如下：

$$E_1=1.233826$$

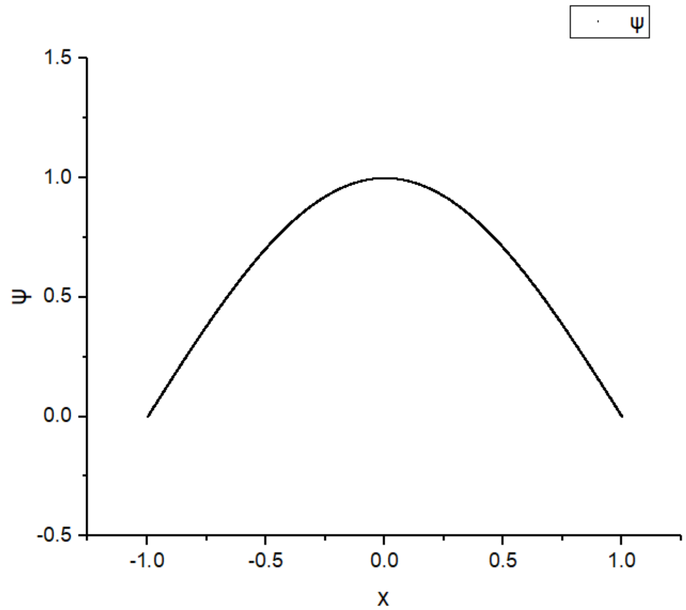

图 2: 一维无限深方势阱$E = 1.233826$时的波函数

取初始能量区间$[4, 5]$，奇宇称，结果如下：

$$E_2 = 4.934802$$

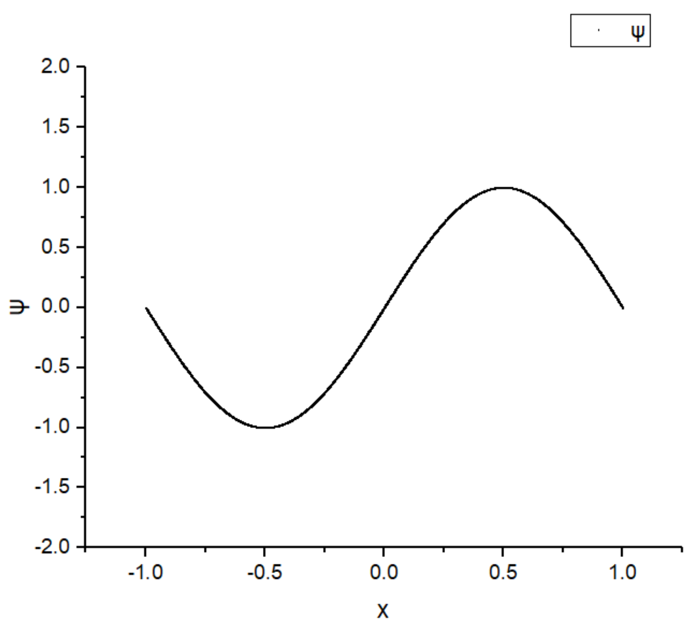

图 3: 一维无限深方势阱$E = 4.934802$时的波函数

取初始能量区间$[11, 12]$，偶宇称，结果如下：

$$E_3 = 11.104370$$

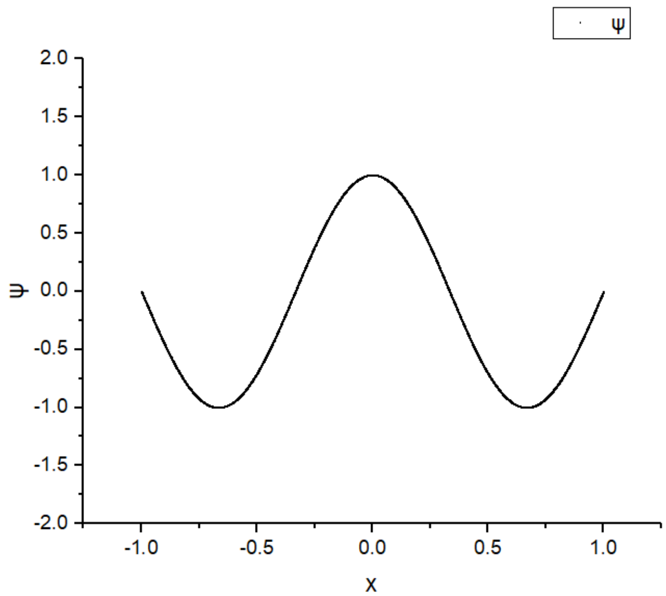

图 4: 一维无限深方势阱$E = 11.104370$时的波函数

取初始能量区间[18, 20]，奇宇称，结果如下：

$$E_4 = 19.739209$$

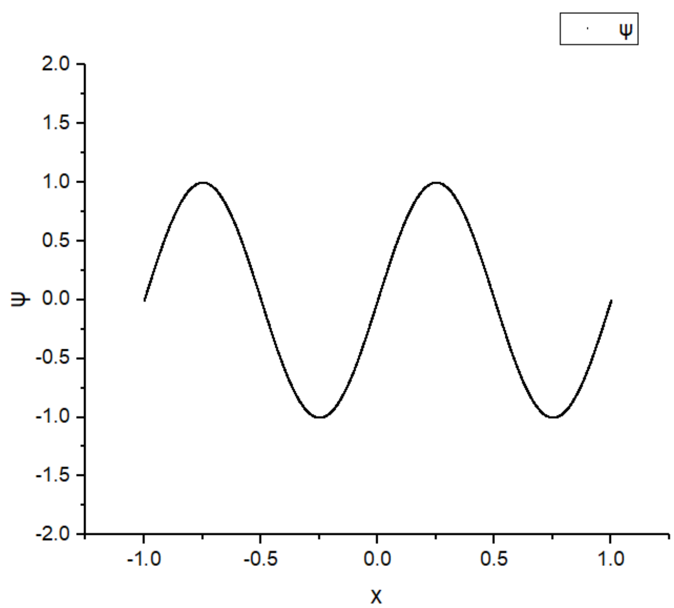

图 5: 一维无限深方势阱$E = 19.739209$时的波函数

取初始能量区间[30, 32]，偶宇称，结果如下：

$$E_5 = 11.104370$$

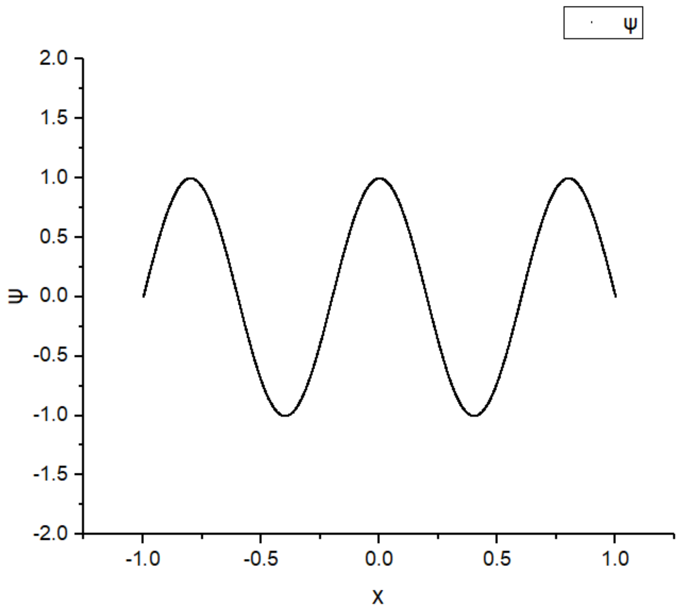

图 6: 一维无限深方势阱$E = 30.845581$时的波函数

以上分别对应一维无限深势阱的基态，第一二三四激发态。

下面与理论值作比较。我们知道，一维无限深势阱的能量与波函数表达式为：

$$\begin{cases} E_n = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{8mL^2} & n = 1, 2... \\ \psi_n(x) = \sqrt{\dfrac{1}{L}}\sin(\dfrac{n\pi}{2L}(x+L)) & , n = 1, 2... \end{cases}$$

取$L = 1$，$m = 1$,$\hbar = 1$，得到能量的理论值表达式：

$$E_n = \frac{n^2\pi^2}{8} \quad n = 1, 2...$$

表格如下：

理论值	计算值
1.233701	1.233826
4.934802	4.934802
11.103305	11.104370
19.739209	19.739209
30.842514	30.845581

表 1: 一维无限深势阱能量理论值与计算值对比

可见对于奇宇称而言计算结果较为精确，偶宇称稍有偏差，但考虑到二分法的效率较高，可以说较为良好地计算得到了一维无限深势阱下的能量本征值。

下面讨论基态能量附近的波函数情形：

在基态$E = 1.233826$附近，分别取$E = 1$，$E = 1.4$，$E = 1.6$，如下：

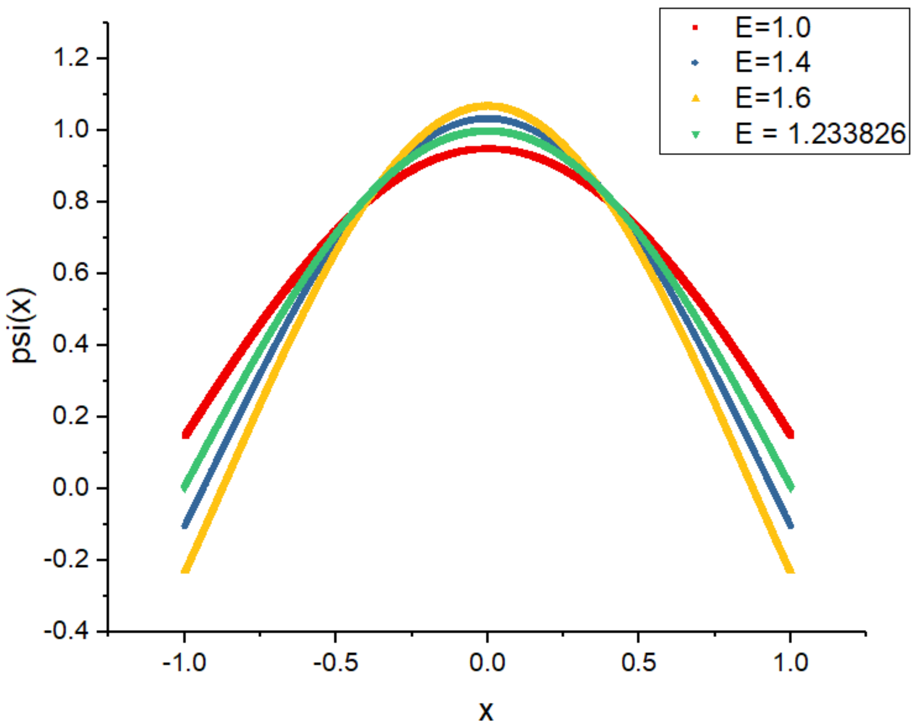

图 7: 一维无限深方势阱基态附近的波函数

可见对于小于基态能量的边界处ψ值大于零，大于基态能量的边界处ψ值小于零，这是符合我们的算法的。

四 结论

本次作业利用Numerov+打靶法的方法，求解了一维无限深势阱的能量的本征值，并且绘制了各种本征值下对应的波函数，结合量子力学知识，我们发现能量本征值结果与理论值相差不大，波函数也符合正弦特性，说明结果良好。